



# Métamatériaux "tout-diélectrique" pour le térahertz

Simon Marcellin

## ► To cite this version:

Simon Marcellin. Métamatériaux "tout-diélectrique" pour le térahertz. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Paris Saclay (COmUE), 2016. Français. NNT: 2016SACLS112. tel-01338720

**HAL Id: tel-01338720**

**<https://theses.hal.science/tel-01338720>**

Submitted on 29 Jun 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

NNT : 2016SACLS112

THESE DE DOCTORAT  
DE L'UNIVERSITE PARIS-SACLAY,  
préparée à l'Université Paris-Sud

ÉCOLE DOCTORALE N° 575  
Ecole Doctorale EOBÉ (Electrical, Optical, bio-physics and engineering)

IEF - Institut d'Electronique Fondamentale

Spécialité de doctorat : Physique

Par

**Simon MARCELLIN**

Métamatériaux « *tout-diélectrique* » pour le térahertz

**Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 24 Mai 2016 :**

**Composition du Jury :**

Mme. VIGNERAS Valérie  
M. VERDEYME Serge  
M. CHUSSEAU Laurent  
M. BEGAUD Xavier  
M. QUEFFELEC Patrick  
M. AKMANSOY Eric

Pr. Uni. Bordeaux, IMS  
Pr. Uni. Limoges, XLIM  
DR. Uni. Montpellier, IES  
Pr. TELECOM ParisTech  
Pr, Uni. BO, STICC  
MC, Uni. Paris-Sud, IEF

Rapporteur  
Rapporteur  
Président du Jury  
Examineur  
Examineur  
Directeur de thèse





## Remerciements

Je tiens avant tout à remercier Eric Akmansoy, mon directeur de thèse, pour m'avoir pris, soutenu et guidé tout au long de cette thèse, malgré les hauts et les bas. Merci pour son encadrement, son exigence et surtout pour son important soutien au moment de la rédaction de ce manuscrit. Sa rigueur et sa précision furent d'une aide précieuse.

Merci également à Anatole Lupu notre chef d'équipe, ainsi qu'à tous les membres permanents de l'équipe CRIME : Shah Nawaz Burokur, Aloyse Degiron, Frédérique Gadot et André de Lustrac pour la qualité des échanges que nous avons eus mais aussi pour leur enthousiasme et leur sympathie tout au long de cette thèse, et particulièrement au cours des repas partagés au mythique CESFO.

Remerciements chaleureux à tous mes camarades de combat, les doctorants de l'équipe, en commençant par les historiques Alexandre Sellier et Dylan Germain, présents bien avant moi et dont l'ombre plane encore parfois sur l'IEF. La richesse des échanges à la pause-café n'a guère trouvé d'équivalent par la suite ! Salutations particulières à Natalia Dubrovina, cette différence au score de seulement une minute au 10km-l'Equipe me hantera, je pense, toute ma vie. Merci aussi aux camarades Jianjia Yi, Quynh le Van, Yulong Fan, Fabian Gaufillet, Alassane Sidibe, Anna Niang, Eric Tea et Hélène Spisser, fussent-ils des camarades de pause-café, de pause déjeuner, de couloir, de repas d'un soir, de barbecue, d'*escape-room* ou même de *laser-game*, il faut dire que les champs de bataille sont aussi variés que surprenants.

Je remercie aussi les anciens post-docs, Tatiana Teperik, Jiaming Hao, l'imbattable au badminton, Paul-Henri Tichit, dont la présence physique au sein de l'IEF représentait souvent une plus grande incertitude que le principe d'Heisenberg lui-même. Merci aussi pour les quelques parties de football entre les filières matheuses du campus, de grands moments.

Salutations aux nouvelles – et déjà moins nouvelles – recrues : Vincent Brac de la Perrière, Elena Bochkova et Badreddine Ratni, pour maintenir le flambeau et participer à abaisser la moyenne d'âge de l'équipe, ce n'est pas rien.

A ceux qui ne font plus partie de l'équipe à l'heure où j'écris ces lignes : bon vent ! A ceux qui seront encore présents pour quelques années : bon courage !

Je remercie enfin l'ensemble du laboratoire, les membres du consortium et toutes les personnes que j'ai pu croiser pendant cette thèse, pour leur accueil, leur sympathie et pour tous les moments partagés, créant ainsi un cadre agréable pour ces (un peu plus de) trois ans de thèse.





# Table des matières

Introduction générale	11
<b>I État de l’art</b>	<b>15</b>
<b>1 Contexte historique</b>	<b>16</b>
1.1 Métamatériaux . . . . .	16
1.2 Résonateurs diélectriques . . . . .	22
<b>2 Applications des métamatériaux</b>	<b>23</b>
2.1 Le camouflage ( <i>cloaking</i> ) . . . . .	24
2.2 Les lentilles parfaites ou super-résolutions . . . . .	26
2.3 La miniaturisation . . . . .	28
2.4 La sélectivité . . . . .	29
<b>3 Conclusion</b>	<b>29</b>
<b>II Propriétés électromagnétiques des métamatériaux</b>	<b>31</b>
<b>1 Rappels de base</b>	<b>32</b>
1.1 Propagation des ondes dans le vide . . . . .	32
1.2 Propagation des ondes dans les milieux matériels . . . . .	36
1.3 Définition d’un indice négatif . . . . .	40
1.4 Propagation des ondes dans un milieu d’indice négatif . . . . .	41
1.5 Pourquoi faire des métamatériaux tout-diélectriques? . . . . .	43
<b>2 Résonateurs diélectriques</b>	<b>45</b>
2.1 Modèle de Cohn . . . . .	45
2.2 Parallélépipède . . . . .	47
<b>3 Modélisation par éléments finis</b>	<b>50</b>
3.1 Pourquoi faire une analyse numérique? . . . . .	50
3.2 Principe de la méthode des éléments finis . . . . .	50
3.3 Le logiciel HFSS . . . . .	52

<b>4</b>	<b>Méthode d'extraction des paramètres effectifs</b>	<b>56</b>
4.1	Méthode NRW . . . . .	56
4.2	Kramers-Kronig appliqué au choix de la branche . . . . .	58
4.3	Application à des résonateurs diélectriques simples . . . . .	62
4.4	Limites de la précision HFSS . . . . .	64
4.5	Problématique de la bande de résonance . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>74</b>
<b>III</b>	<b>Choix du matériau au Téraherzt</b>	<b>77</b>
<b>1</b>	<b>Conditions d'apparition des résonances</b>	<b>78</b>
1.1	Sur la permittivité du matériau . . . . .	78
1.2	Sur les pertes du matériau . . . . .	79
<b>2</b>	<b>Comportement des diélectriques au térahertz</b>	<b>81</b>
2.1	Différentes contributions selon la fréquence . . . . .	81
2.2	Modèles de permittivité au térahertz . . . . .	83
<b>3</b>	<b>Matériaux étudiés dans la gamme Téraherzt</b>	<b>88</b>
3.1	Dioxyde du Titane ( $\text{TiO}_2$ ) . . . . .	88
3.2	Titanate de Strontium ( $\text{SrTiO}_3$ ) . . . . .	90
3.3	Titanate de Baryum ( $\text{BaTiO}_3$ ) et dérivés . . . . .	98
3.4	Tantalate de Lithium ( $\text{LiTaO}_3$ ) . . . . .	100
3.5	Titanate de Magnésium ( $\text{MgTiO}_3$ ) . . . . .	101
3.6	Récapitulatif . . . . .	103
<b>IV</b>	<b>Résultats numériques</b>	<b>105</b>
<b>1</b>	<b>Point de départ aux micro-ondes</b>	<b>107</b>
<b>2</b>	<b>Métamatériaux tout-diélectrique au Téraherzt</b>	<b>108</b>
2.1	$\text{SrTiO}_3$ . . . . .	108
2.2	$\text{TiO}_2$ . . . . .	135
2.3	TEMEX Ceramics . . . . .	162

<b>3</b>	<b>Métamatériaux tout-diélectrique aux micro-ondes</b>	<b>164</b>
3.1	TiO <sub>2</sub> . . . . .	164
3.2	SrTiO <sub>3</sub> . . . . .	169
<b>4</b>	<b>Perspectives</b>	<b>173</b>
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>174</b>
	<b>Conclusion générale</b>	<b>177</b>
	<b>Annexes</b>	<b>181</b>
A.1	Polarisation individuelle à l'échelle microscopique . . . . .	181
A.2	Du microscopique au macroscopique : Clausius-Mossotti . . . . .	183
A.3	Inclusions dans un milieu hôte : Maxwell Garnett . . . . .	185
	<b>Références</b>	<b>191</b>



# Symboles et abréviations

## Symboles :

$c$  : célérité de la lumière dans le vide ( $= 299\,792\,458\,m.s^{-1}$ )

$\epsilon_0$  : permittivité du vide ( $\simeq 8.854187.10^{-12}F.m^{-1}$ )

$\mu_0$  : perméabilité du vide ( $= 4\pi.10^{-7} \simeq 1.257.10^{-6}H.m^{-1}$ )

$\epsilon_r$  : permittivité relative ( $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$ )

$\mu_r$  : perméabilité relative ( $\mu = \mu_0\mu_r$ )

$\nu$  : fréquence d'étude

$\lambda$  : longueur d'onde d'étude

$\lambda_0$  : longueur d'onde dans le vide

$\sigma$  : conductivité électrique

$\rho$  : densité volumique de charge

$\mathbf{J}$  : densité volumique de courant

$\mathbf{E}$  : champ électrique

$\mathbf{H}$  : champ magnétique

$\mathbf{D}$  : champ de déplacement électrique ( $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ )

$\mathbf{B}$  : champ de flux magnétique ( $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$ )

## Abréviations :

**ADM** : All-Dielectric Metamaterials

**SRR** : Split-Ring-Resonator

**NRW** : Nicolson-Ross-Weir

**LHM** : Left-Handed Media

**FDTD** : Finite-Difference Time-Domain

**FEM** : Finite Element Method

**FIT** : Finite Integration Technique

**PEC** : Perfect Electric Conductor

**PMC** : Perfect Magnetic Conductor



# Introduction générale

« *Electromagnetic materials enter the negative age* »

John Pendry - *Physics World* - 2001 [1]

C'est par ces termes que John Pendry de l'Imperial College titrait l'un de ses articles en 2001, illustrant ainsi, non sans un certain humour, le caractère à la fois insolite et révolutionnaire d'une nouvelle branche de la recherche en électromagnétisme : les métamatériaux. Il est vrai que le concept de « réfraction négative » souvent associé aux métamatériaux a de quoi perturber. En réalité, John Pendry valide par cette phrase les preuves expérimentales d'un concept théorisé 30 ans plus tôt, en 1968, par un scientifique russe, Victor Veselago, le premier à avoir émis l'hypothèse d'un milieu d'indice négatif.

Cette citation peut néanmoins prêter à confusion, car elle laisse à penser que le champ d'étude des métamatériaux se résume à la réfraction négative, ce qui est très réducteur. Bien que notre thèse se consacre également à la mise en évidence d'un indice négatif dans la gamme térahertz, ce n'est pas le seul intérêt de ces structures, nous le verrons bientôt au chapitre I. Il est donc nécessaire de donner une véritable définition d'un métamatériau.

Les métamatériaux sont des matériaux composites artificiels, dont la structure interne est périodique et surtout sub-longueur d'onde. Ils sont donc assimilables à des matériaux homogènes et peuvent être décrits par des paramètres dits « effectifs », comme la permittivité et la perméabilité. C'est seulement dans le cas où un milieu possède une permittivité et une perméabilité négatives simultanément qu'il se comportera comme un milieu d'indice négatif (pour des raisons qui deviendront claires au chapitre II). Ces structures ont ainsi des propriétés que l'on ne retrouve pas dans la nature (du moins dans l'état actuel des connaissances), ceci explique le préfixe méta- signifiant *au-delà de*. La figure I.1 permet de résumer la situation. En effet, jusqu'à une date récente (disons environ le milieu du XX<sup>ème</sup> siècle) notre monde se limitait à l'étude de matériaux ayant des permittivités et perméabilités strictement positives, à quelques exceptions près comme par exemple les plasmas dont la permittivité est négative. Il a fallu attendre Veselago pour qu'on s'interroge sérieusement sur le cas où ces deux grandeurs physiques sont simultanément négatives, et les années 2000 pour voir les premières réalisations expérimentales émerger. La zone verte sur la figure I.1 représente donc les conditions que l'on ne retrouve pas dans la nature mais que les métamatériaux peuvent reproduire.

Quinze ans plus tard, ce serait un euphémisme de dire que ce concept a réussi à se développer : les métamatériaux sont devenus un domaine de recherche à part entière, regroupant physiciens, chimistes, ingénieurs, etc. sur des thèmes souvent très variés et ce sur tout le spectre électromagnétique. Il attire en grande partie pour ses potentialités, comme par exemple la possibilité de rendre des objets invisibles — nous y reviendrons — ou de fabriquer des lentilles parfaites. Ce domaine de recherche rencontre un succès tel que le nombre de publications sur le sujet par année ne fait que croître depuis le



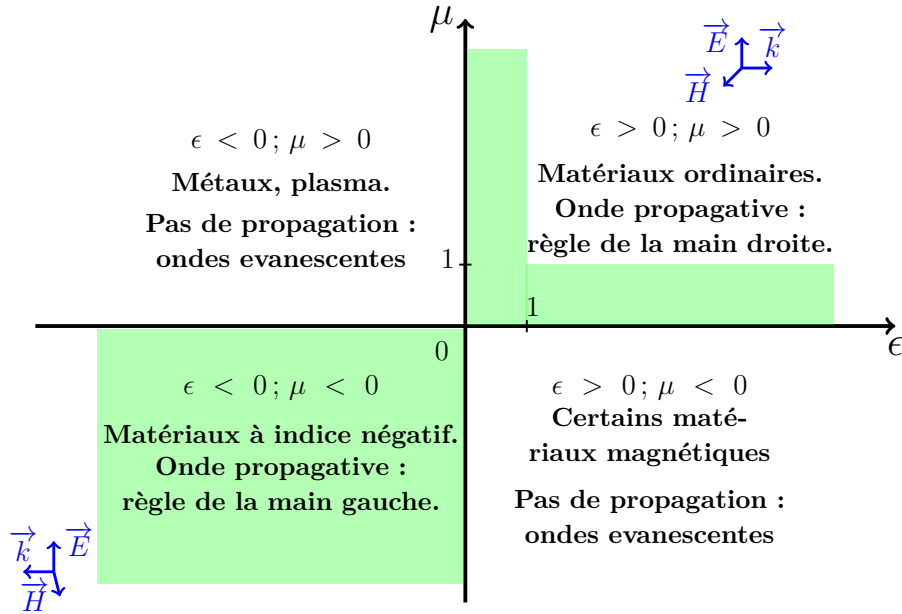


FIGURE I.1 – Classification des matériaux en fonction de leurs réponses électrique  $\epsilon$  et magnétique  $\mu$ . La zone colorée en vert correspond au domaine d'application des métamatériaux puisque ce sont des conditions que l'on ne retrouve pas dans la nature.

début des années 2000 (voir début chapitre I), cela sans compter les articles dans les journaux scientifiques (Pour la science, La recherche, etc.) et même non-scientifiques (Le monde, Les échos, etc.).

Dans ce contexte, mon travail de thèse a pour but de démontrer la faisabilité de métamatériaux « tout-diélectrique », c'est-à-dire dont la structure interne n'est composée que de matériaux diélectriques, dans la gamme térahertz, et se comportant comme un matériau d'indice négatif. Nous cherchons à savoir s'il est possible de transposer des travaux déjà existants aux micro-ondes, basés sur les résonances de Mie de structures diélectriques, à beaucoup plus haute fréquence. Sachant que les propriétés des matériaux diélectriques changent considérablement selon la gamme de fréquence considérée, monter en fréquence ne représente pas juste un problème de miniaturisation des structures, mais aussi de révision des matériaux utilisés, et de compréhension des nouvelles interactions et phénomènes physiques mis en jeu.

Pour commencer, l'objectif du chapitre I est de dresser un rapide état de l'art sur les métamatériaux et les résonateurs diélectriques, en présentant les résultats scientifiques marquants de chaque domaine et en axant ensuite ceux-ci vers les travaux consacrés aux métamatériaux diélectriques, le sujet de cette thèse. En plus de l'état de l'art, nous verrons les applications possibles (et concrètes) des métamatériaux, qui ne se résument pas à des indices négatifs.

Le chapitre II sera consacré au développement de l'ensemble des concepts physiques nécessaires à la bonne compréhension de cette thèse. Nous clarifierons mathématiquement ce qu'est un milieu d'indice négatif, ce que cela implique en termes de propagation des ondes, et le rôle des diélectriques dans l'obtention d'un indice négatif. La deuxième

partie de ce chapitre présentera un des modèles analytiques existants permettant de décrire le comportement d'un résonateur diélectrique. Une troisième partie présentera notre outil de modélisation numérique, à savoir les éléments finis, utilisés via un logiciel commercial, Ansoft HFSS, dont nous décrirons brièvement le fonctionnement. Enfin, le fonctionnement du code d'extraction des paramètres effectifs utilisé au cours de cette thèse sera présenté dans une quatrième partie. Les limites de la méthode d'extraction seront aussi discutées.

Ces bases théoriques et numériques posées, nous aborderons au chapitre III le comportement des diélectriques aux fréquences térahertz, et nous verrons les conditions à fixer pour observer des résonances de Mie à ces fréquences. La présence de phonons optiques, des vibrations propres au réseau cristallin, vont avoir un effet sur la permittivité. Ceci nous obligera à avoir des critères plus sélectifs quant au choix du matériau diélectrique utilisé.

Le chapitre IV présentera enfin l'ensemble des résultats importants de simulations effectuées au cours de cette thèse. Partant des travaux initiaux de Thomas Lepetit aux micro-ondes, nous commencerons par montrer la succession des étapes qui nous ont permis l'exportation de ce concept de fabrication au térahertz. Nous verrons ensuite les nombreux ajustements nécessaires à l'obtention d'un indice négatif, tout en approfondissant certains aspects essentiels, comme le phénomène de couplage, très important dans ces structures. Deux céramiques ont surtout été utilisées : le  $\text{SrTiO}_3$  et le  $\text{TiO}_2$ . Chacune d'entre elle a fait l'objet d'une étude détaillée au térahertz. Des simulations aux micro-ondes ont également été effectuées afin de vérifier si certains phénomènes observés se retrouvaient à plus basse fréquence. Enfin, nous énoncerons les perspectives que les résultats de cette thèse laissent entrevoir.

Cette thèse s'inscrit dans le projet ANR *TeraMetaDiel* n°12-BS03-0009. Elle se fait en étroite collaboration avec des « céramistes » (SPCTS - UMR 7315), des chimistes (CIRIMAT - UMR 5085) et des spécialistes de la caractérisation térahertz (LPA - UMR 8551), l'IEF étant mon laboratoire d'accueil pour les étapes de modélisations. Thales TRT et l'Unité Mixte de Physique (UMR 137) est aussi associé à ce projet.



## Chapitre I

# État de l'art

## Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Contexte historique</b>	<b>16</b>
1.1	Métamatériaux . . . . .	16
1.1.1	Des premières ébauches... . . . .	17
1.1.2	...aux réalisations majeures... . . . .	18
1.1.3	...jusqu'aux dernières avancées . . . . .	19
1.1.4	Naissance et développement des métamatériaux tout-diélectriques . . . . .	20
1.2	Résonateurs diélectriques . . . . .	22
<b>2</b>	<b>Applications des métamatériaux</b>	<b>23</b>
2.1	Le camouflage ( <i>cloaking</i> ) . . . . .	24
2.2	Les lentilles parfaites ou super-résolutions . . . . .	26
2.3	La miniaturisation . . . . .	28
2.4	La sélectivité . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Conclusion</b>	<b>29</b>

---

Cette première partie fait un état des lieux de la recherche scientifique dans les métamatériaux et les résonateurs diélectriques. Pour commencer, nous effectuerons une chronologie des diverses publications et résultats expérimentaux dans chaque domaine séparément. Comme on le voit, ce sont deux domaines de recherche clairement distincts à leur origine mais qui néanmoins trouvent un champ d'application commun dans les métamatériaux « tout-diélectrique », le sujet de cette thèse. Précisons cependant que cet historique ne se veut pas exhaustif mais tente tout de même d'être le plus complet possible, en mettant en avant les faits marquants de chaque domaine.

## 1 Contexte historique

### 1.1 Métamatériaux

Les métamatériaux sont des milieux artificiels, dont la structure périodique sub-longueur d'onde permet d'avoir un contrôle sur la permittivité ( $\epsilon$ ), la perméabilité ( $\mu$ ), ou les deux grandeurs à la fois, offrant la possibilité d'un indice négatif, une condition qui n'existe pas dans la nature.

Initialement purs objets théoriques si l'on pense à l'article fondateur de Veselago, où l'auteur se questionnait sur les conséquences physiques d'un  $\epsilon$  et d'un  $\mu$  négatif dans les équations de Maxwell [2], les métamatériaux sont devenus, depuis les années 2000 et en moins d'une décennie (figure I.1.1), l'une des technologies émergentes les plus prolifiques, car ils touchent à des domaines très différents comme l'électronique, l'optique, le magnétisme, la mécanique, l'acoustique, la science des matériaux en général, etc. Ils sont suffisamment « à la mode » pour être depuis 2010 à l'origine d'un nouveau mot-clés dans la recherche scientifique, avec l'apparition du terme « metadevices », désignant toute nouvelle fonctionnalité pratique issue de ce type de structures [3].

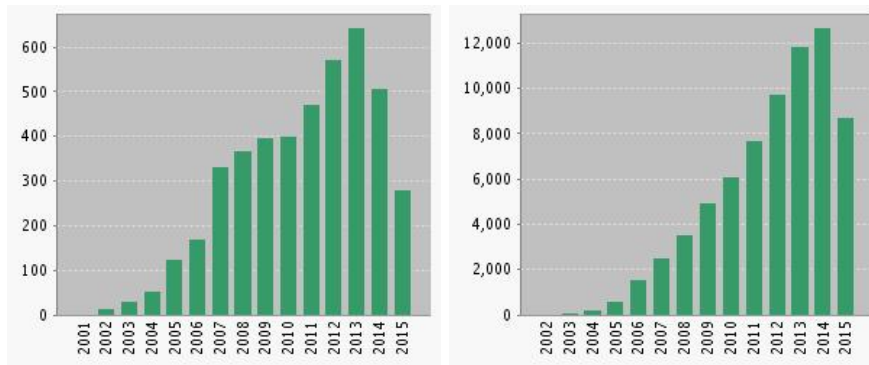


FIGURE I.1.1 – Évolution de l'occurrence du mot « Metamaterials » dans les publications scientifiques depuis l'an 2000 (Gauche). Nombre de citations de ces articles sur la même période (Droite). Source : Web Of Science<sup>TM</sup>.

Cousins d'une certaine manière des cristaux photoniques, puisqu'ils permettent un contrôle de la lumière tant à l'échelle centimétrique que nanométrique, les métamatériaux sont en réalité un domaine de recherche plus ancien qu'on ne le pense, c'est ce que l'on va voir maintenant.

### 1.1.1 Des premières ébauches...

L'article du physicien russe Victor Veselago fait souvent office de point de départ lorsque l'on parle des métamatériaux, à juste titre puisqu'il y fait part de ses réflexions sur ce qu'il se passerait si la permittivité et la perméabilité d'un milieu étaient négatives en même temps [2]. On peut néanmoins remonter un peu plus loin, car bien que le terme n'existait pas encore, le premier « métamatériau » au sens strict, c'est-à-dire composé de « méta-atomes » artificiels permettant le contrôle des ondes, existait déjà. En effet, Jagadis Chunder Bose proposa en 1898 des structures chirales, aux propriétés non-naturelles, en tordant sur elles-mêmes des fibres végétales (jute) créant ainsi une anisotropie [4]. Il voulait mettre en évidence un effet de polarisation dans des solutions à base de sucre. Il forme, avec ces fibres de jute torsadées, un des premiers atomes artificiels de l'histoire, visible sur la figure I.1.2. De la même manière, on peut considérer les hélices filaires diluées dans un milieu hôte de Karl Ferdinand Lindman (1914) comme une étape dans la recherche de milieux artificiels capables de contrôler des ondes [5]. En 1952 également, S.A. Schelkunoff et H. Friis proposèrent dans un livre commun une méthode pour augmenter la perméabilité d'une structure artificielle diélectrique [6].

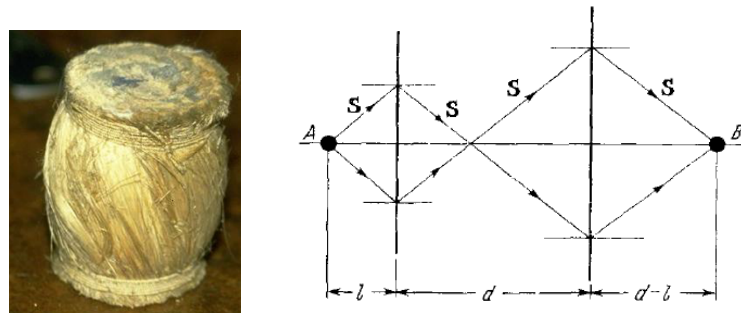


FIGURE I.1.2 – Premières ébauches de métamatériaux dans l'Histoire. À gauche, le méta-atome de J. Bose en 1898. À droite, première représentation d'une super-lentille par Veselago. Images tirées de Emerson *et al.* (1997) [7] et Veselago *et al.* (1968) [2].

Néanmoins, ces exemples ne sont que des balbutiements. D'un point de vue théorique, Victor Veselago est bien le premier à avoir posé les bases d'une réflexion sur le sens et les conséquences d'un matériau à indice négatif. Il est le premier à montrer qu'une onde dans ce type de milieu aurait son vecteur d'onde et son vecteur de Poynting anti-parallèles. Le trièdre formé habituellement par le vecteur d'onde, le champ électrique et le champ magnétique ne serait donc plus direct mais indirect, d'où l'appellation parfois de matériaux « main-gauche » pour désigner les métamatériaux. Il est aussi le premier à montrer le principe des lentilles planes, ou super-lentilles (figure I.1.2), que nous détaillerons dans la partie 2.2, il montre de plus que l'effet Doppler et l'effet Tcherenkov se retrouveraient inversés dans un milieu d'indice négatif.

Cependant, comme Veselago le rappelle à la fin de son article, l'absence de matériaux à perméabilité négative empêche toute vérification expérimentale, et il faudra attendre plusieurs années avant que cela soit le cas.

### 1.1.2 ...aux réalisations majeures...

Pour concevoir les milieux imaginés par Veselago, il fallait en fait deux choses : avoir un réseau permettant une permittivité négative, un autre permettant une perméabilité négative, et, en espérant que les propriétés s'additionnent, combiner les deux pour avoir un milieu d'indice de réfraction négatif.

Une permittivité négative se trouve aisément, il suffit de considérer la réponse d'un métal en dessous de sa fréquence plasma. L'équation (I.1.1) montre la relation entre la permittivité  $\epsilon(\omega)$  d'un métal, sa fréquence plasma  $\omega_p$  et un terme de perte  $\gamma$  associé :

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (\text{I.1.1})$$

Cependant, cette fréquence plasma se situe en général dans la gamme visible ou le proche ultra-violet, aux fréquences micro-ondes, il n'y a plus que la partie imaginaire de la permittivité qui domine. La solution est donc de « diluer » le métal dans un milieu hôte (tel que l'air) afin d'obtenir un ordre de grandeur « raisonnable » pour la permittivité. Les premières études théoriques de John Pendry en 1996 vont dans ce sens, il montre qu'il est possible de diminuer de six ordres de grandeur la fréquence plasma (effective) d'un métal, et donc d'autant la zone où la permittivité effective est négative [8]. Ainsi, en fonction du taux de remplissage et de la période du réseau, on peut choisir la fréquence de fonctionnement de la permittivité négative.

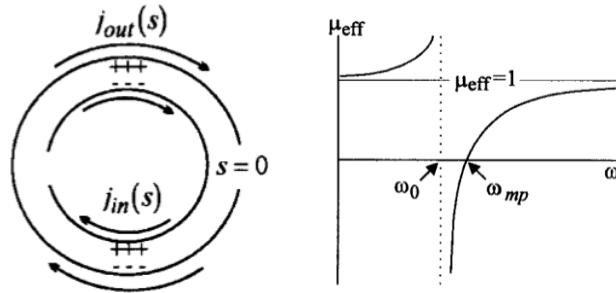


FIGURE I.1.3 – Effet capacitif dans deux anneaux fendus, ou SRR (à gauche) permettant une perméabilité négative sur une certaine gamme de fréquence (à droite). Source des figures : Pendry *et al.* (1999) [9].

Concernant la perméabilité, c'est plus complexe. Une perméabilité négative est difficilement observable à l'état naturel, seuls quelques matériaux antiferromagnétiques ou ferrimagnétiques le permettent. A partir des travaux de Hardy et Whitehead en 1981 sur des anneaux coupés à forte réponse magnétique [10], Pendry proposa de jouer sur l'effet capacitif de deux anneaux métalliques fendus (les fameux SRR, pour *Split-Ring Resonator*) imbriqués l'un dans l'autre [9], comme l'illustre la figure I.1.3, à gauche. La perméabilité d'une telle structure se définit ainsi :

$$\mu_{eff}(\omega) = 1 - \frac{F}{1 + i\frac{\gamma}{\omega} - \frac{\omega_0^2}{\omega^2}} \quad (\text{I.1.2})$$

où  $F$  est le taux de remplissage des anneaux métalliques dans la cellule élémentaire,  $\gamma$  le terme de perte et  $\omega_0$  la fréquence de résonance des SRR. En effet, le deuxième anneau sert à ajouter un courant de rappel au courant induit par la circulation des charges dans le premier anneau. Ce courant de rappel donne un caractère résonant à la perméabilité *effective*. Une « fréquence plasma magnétique », notée  $\omega_{pm}$ , peut ainsi être définie :

$$\omega_{pm}^2 = \frac{\omega_0^2}{1 - F} \quad (\text{I.1.3})$$

La perméabilité *effective* est donc négative en dessous de cette fréquence plasma  $\omega_{pm}$ , et au-dessus de la fréquence de résonance des anneaux  $\omega_0$ , comme illustré à droite sur la Figure I.1.3.

Par la suite, D.R. Smith fut le premier à montrer la faisabilité d'un indice négatif en combinant ces deux méthodes [11]. Un réseau espacé de fils de cuivre sur un circuit imprimé permettait en effet une permittivité *effective* négative, tandis qu'en parallèle, un réseau de SRR métalliques permettait une perméabilité *effective* négative, confirmant ainsi les travaux théoriques de John Pendry. Ces avancées théoriques faites, il ne manquait plus que le passage à la pratique. L'année suivante, en 2001, avec R.A. Shelby, la vérification expérimentale du premier métamatériau à indice négatif est faite dans la gamme micro-ondes (10 GHz) [12].



FIGURE I.1.4 – Le premier métamatériau de l'histoire, dont la cellule élémentaire est de taille millimétrique. Il est composé d'un réseau de fils de cuivre ( $\epsilon_{eff} < 0$ ) et de SRR métalliques ( $\mu_{eff} < 0$ ) sur un circuit imprimé. La combinaison des deux permet d'avoir un indice *effectif* négatif vers 10 GHz [12].

### 1.1.3 ...jusqu'aux dernières avancées

Les années 2000 vont voir ce domaine se développer considérablement. Des applications importantes vont apparaître (voir la partie 2 consacrée) et les dispositifs ne vont cesser de se perfectionner. On observe une montée progressive vers les hautes fréquences, avec la volonté de se rapprocher du domaine du visible. Cette « montée » vers le visible va s'accompagner, en plus d'une miniaturisation, d'une simplification des structures. Celle-ci s'explique par plusieurs facteurs, notamment par un effet capacitif plus important aux petites dimensions, permettant de se passer progressivement du second anneau de la Figure I.1.3, puis de l'anneau lui-même. Ainsi, dans certains cas, comme chez Shalaev *et al.* en 2005, de simples tiges parallèles en réseau suffisent : la permittivité *effective*



négative est assurée par les tiges métalliques elles-mêmes en dessous de leur fréquence plasma, la perméabilité *effective* négative est assurée par les courants asymétriques liés à la proximité des tiges entre elles [13]. La figure I.1.5 illustre cette progression vers le visible.

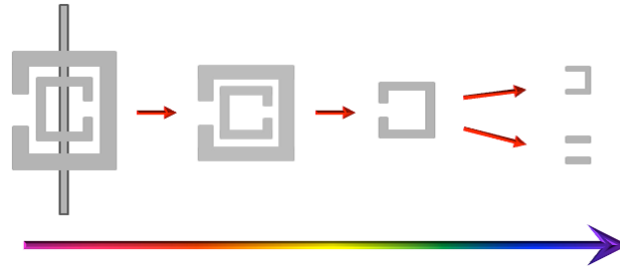


FIGURE I.1.5 – Schématisation de l'évolution de la structure de base des métamatériaux métalliques lorsqu'on se rapproche du visible. La miniaturisation s'accompagne également d'une simplification des structures.

Pour illustrer cette progression, on peut citer les travaux de Markos et Soukoulis en 2003, ces derniers ayant fabriqué, sur le principe des SRR et des tiges métalliques de Pendry, un métamatériau à indice négatif vers 10 GHz [14]. La même année, Parazzoli *et al.* proposa une structure légèrement différente de Smith capable d'avoir un indice négatif vers 12,5 GHz [15]. Des perméabilités négatives furent progressivement obtenues vers 1 THz [16], 6 THz [17] et 60 THz [18], toujours sur le même principe, avant que l'équipe de Moser *et al.* obtienne en 2005 un indice négatif vers 2,4 THz avec un jeu de SRR et de tiges métalliques de dimensions inférieures à  $100\ \mu m$  [19]. En même temps, Soukoulis *et al.* propose des structures en « U » à base d'or, permettant un indice négatif bien plus haut en fréquence, vers 100 THz [20]. Quant à l'optique, il fut atteint par Shalaev *et al.* en 2005 à l'aide d'un réseau de tiges nanométriques parallèles [13]. Sur un principe légèrement différent (une grille métallique de type *fishnet*, à base d'argent), un indice négatif fut mesuré vers 200 THz par Dolling *et al.* en 2006 [21]. Des résonances magnétiques allant jusqu'à 600 THz furent proposées en 2005, à l'aide de structures « multi-gaps », sortes de carrés dont les côtés sont fendus en leur centre, et dont la fréquence de résonance augmente avec le nombre de fentes [22].

Les travaux abordés jusqu'à maintenant fonctionnent tous sur le principe des SRR métalliques de Pendry, néanmoins, celui-ci atteint vite ses limites [23]. Le concept fonctionne certes à hautes fréquences, jusque dans le domaine du visible [13,24,25], cependant les pertes inhérentes des métaux dans cette gamme restent un problème. C'est pourquoi des méthodes alternatives ont vu le jour, notamment celles basées sur des matériaux diélectriques, à fort indice de réfraction.

#### 1.1.4 Naissance et développement des métamatériaux tout-diélectriques

En effet, les lois de la diffusion de la lumière font que pour des particules sphériques ayant un indice de réfraction suffisamment élevé, il est possible d'observer toute une gamme de résonances magnétiques et électriques à l'intérieur, on les appelle des résonances de Mie [26]. Les diélectriques avec une permittivité suffisante permettent de bien observer ce phénomène, nous en parlerons plus en détails dans le chapitre II de cette

thèse. En outre, contrairement aux métaux, les diélectriques n'ont pas de perte par effet Joules puisqu'ils ne possèdent pas de porteurs libres, ce qui en fait, comparativement, des matériaux à plus faibles pertes. Nous relativiserons ce dernier point dans la chapitre III de cette thèse.

Ce constat lança la recherche dans les métamatériaux « tout-diélectrique » (ADM pour *All-Dielectric Metamaterials*), bonne alternative aux métamatériaux métalliques. Pendry et O'Brien furent les premiers à s'intéresser à la réponse magnétique de cristaux photoniques cylindriques à grande permittivité, dont le caractère résonant pouvait servir à obtenir un indice négatif [27]. Holloway *et al.* montra en 2003 qu'il était théoriquement possible d'avoir un milieu « doublement négatif » (permittivité et perméabilité négatives simultanément) à l'aide de sphères diélectriques dans un milieu hôte de plus faible permittivité [28]. Les travaux de Vendik *et al.* allèrent un peu plus loin, montrant la possibilité d'un indice négatif vers 67 GHz, à l'aide uniquement de sphères diélectriques [29], comme on le voit sur le figure I.1.6, à gauche. Un article de Vendik en 2006 montre la même étude pour 10 GHz [30].

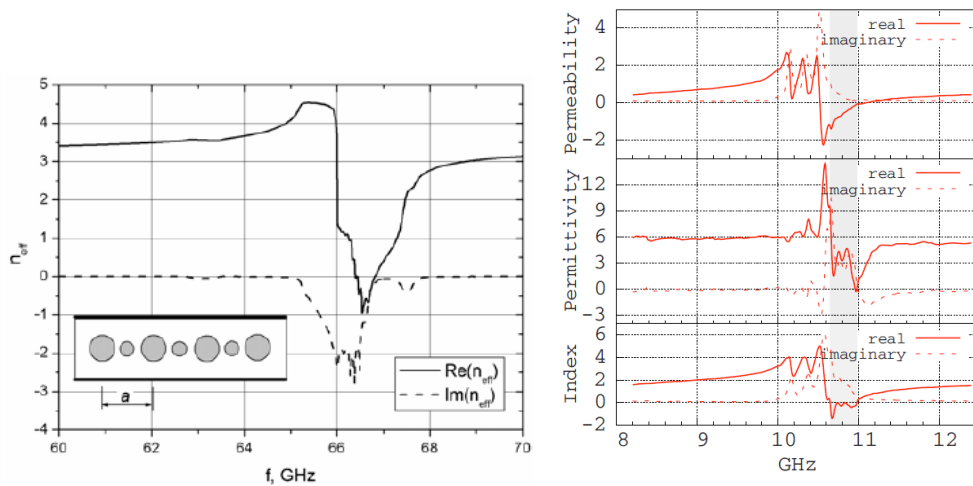


FIGURE I.1.6 – A gauche, une des premières propositions d'un indice négatif avec un métamatériau « tout-diélectrique », ici, des sphères de  $100\ \mu\text{m}$  et  $70\ \mu\text{m}$  de rayon. La permittivité des sphères est de 1000, celui de milieu hôte de 10 [29]. A droite, une vérification expérimentale d'un indice négatif, à l'aide d'un réseau périodique composé de deux tiges diélectriques de section carrée ( $1.3\ \text{mm}$  et  $0.88\ \text{mm}$  de côté) de permittivité relative élevée ( $\epsilon_r = 575$ ) dans un milieu hôte ( $\epsilon_r = 2.85$ ) [31].

Suite à ces avancées, le domaine se développa considérablement. Comme ces nouveaux métamatériaux, grâce notamment à leur géométrie plus simple que les SRR, permettent d'avoir facilement des perméabilités négatives [32–35], beaucoup de travaux couplent des diélectriques avec des structures métalliques dans le but d'avoir un indice négatif [36–38]. Malgré tout, l'intérêt premier des diélectriques est de s'affranchir des contraintes du métal. Les ADM ont donc pris une place de plus en plus importante dans les publications. Un tableau récapitulatif, visible sur la figure I.1.7, montre l'évolution des fréquences de fonctionnement des résonateurs diélectriques dans la littérature.

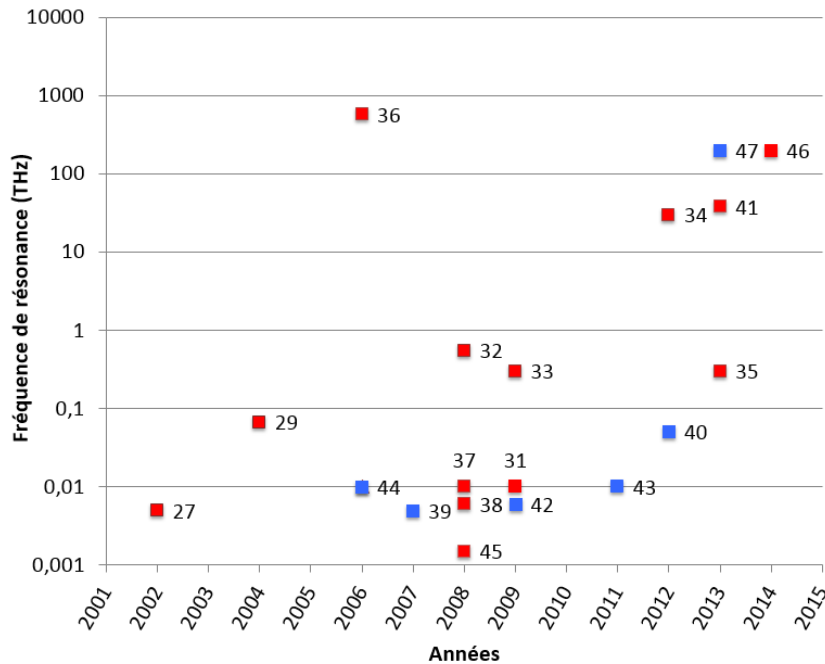


FIGURE I.1.7 – Evolution de la fréquence de fonctionnement des métamatériaux diélectriques au cours du temps. Les carrés bleus désignent des ADM à indice *effectif* négatif, les carrés rouges désignent des cas où les diélectriques n’apportent qu’une perméabilité *effective* négative. Les numéros correspondent aux références bibliographiques [27, 29, 31–47].

A l’heure actuelle, comme le relevait A. Krasnok dans un article récent [48], la volonté est de faire évoluer les métamatériaux vers des dispositifs ayant des applications directes et concrètes, et de ne pas seulement laisser cette technologie confinée dans les laboratoires. Les métamatériaux doivent être maintenant réglables, adaptables et fonctionnels rapidement, d’où le terme naissant de « metadevices » désignant ce type de dispositifs. L’objectif à court terme est de rendre cette technologie plus accessible [3].

## 1.2 Résonateurs diélectriques

L’utilisation des résonateurs diélectriques est relativement ancienne puisqu’il faut remonter aux années 30 (1939) pour voir apparaître ce terme pour la première fois, sous la plume d’un scientifique nommé R.D. Richtmyer. Il constatait à l’époque que des objets non-métalliques pouvaient se comporter comme des résonateurs dans la gamme micro-ondes [49]. Cependant, cet article n’a pas suscité grand intérêt à l’époque, et il faudra attendre longtemps avant de voir ce terme réapparaître, à la parenthèse près de l’article de B.W Hakki en 1940, qui proposa justement sa célèbre méthode (elle portera le nom de « méthode de Hakki et Coleman » du fait de leur article commun en 1960 [50]) dont le but est de mesurer la permittivité et le facteur de qualité d’un résonateur. Cette méthode est très populaire encore aujourd’hui (plus de 2000 citations de l’article en 2015).

Il faut en réalité attendre 1953 pour qu’un papier de Schlicke fasse état d’un maté-

riau à très haute permittivité (entre 1000 et 5000) capable de s'utiliser comme capacité aux fréquences radios [51]. Puis, dans les années 60, les chercheurs redécouvrent progressivement les résonateurs diélectriques en voulant travailler sur des matériaux à haute constante diélectrique et sur les masers (équivalent micro-ondes du laser) [52]. On voit les premières utilisations du  $\text{SrTiO}_3$  chez Rupprecht *et al.* en 1961 [53] et du  $\text{TiO}_2$  chez Okaya *et al.* en 1962 [54]. Ce sont les premiers papiers à aborder une description des modes de résonances de ces matériaux. S. Cohn en 1968 fut le premier à concevoir un modèle théorique, vérifié expérimentalement, pour les résonateurs diélectriques [55], nous reviendrons sur son modèle dans le chapitre II.

Cependant, à cause de leur mauvaise stabilité en température (le  $\text{TiO}_2$  a un coefficient de température<sup>1</sup>  $\tau_f$  de +450 ppm/K, le  $\text{SrTiO}_3$  un coefficient  $\tau_f$  de +800 ppm/K [56]), les diélectriques n'ont pas tout de suite rencontré un grand succès, bien qu'ils intéressaient (et intéressent toujours) leurs utilisateurs pour leurs faibles pertes<sup>2</sup> (souvent  $\tan \delta < 0,01$ ) et leur forte permittivité ( $\epsilon_r \in [10; 10\,000]$  selon les cas). Il faut attendre 1971 et les travaux de l'entreprise Raytheon [57] pour voir apparaître les premiers résonateurs stables en température ( $\tau_f$  compris entre 0 et 6), et conjointement le début de l'utilisation des Perovskites dans ce domaine. L'autre grande avancée est venue du Japon, lorsque l'entreprise Murata mit au point une céramique, non pas stable en température, mais avec un coefficient de température  $\tau_f$  ajustable, allant de +10 ppm/K à -12 ppm/K. Il est ajustable facilement grâce à un simple dosage de sa composition [58]. Quelques céramiques couramment utilisées en tant que résonateurs diélectriques sont regroupées dans la Table 1 afin de visualiser leurs propriétés respectives.

L'utilisation de résonateurs diélectriques s'est maintenant considérablement démocratisée, que ce soit dans la recherche [59, 60] ou l'industrie. Depuis les années 80, ils sont développés par de nombreux professionnels du secteur tels que les déjà cités Murata, Raytheon, mais aussi Bell Labs, Thomson, Trans-Tech, etc. L'importance des industriels dans ce domaine illustre le savoir-faire existant sur ces dispositifs.

## 2 Applications des métamatériaux

Si les métamatériaux jouissent d'un intérêt croissant ces quinze dernières années, c'est pour les retombées technologiques énormes qu'ils laissent entrevoir, via notamment :

- Les techniques de camouflage
- La miniaturisation
- La super-résolution
- La sélectivité

Ces techniques peuvent servir tant dans le domaine militaire que médical, aérospatial, ou simplement dans les télécommunications. Bien qu'il en existe d'autres, nous détaillerons ici ces quelques applications importantes des métamatériaux, à l'aide d'exemples tirés de la littérature.

---

1. Le coefficient en température quantifie la variation relative de la permittivité en fonction de la température. Son expression est :

$$\tau_f = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T}$$

2. On définit parfois les pertes d'un matériau par le rapport de la partie imaginaire sur la partie réelle de sa permittivité relative  $\epsilon_r$ , ce rapport se nomme *tangente de perte*.

Matériau	Perovskite	$\epsilon_r$	$Q$ (à $f$ en GHz)	$\tau_f$ (ppm/K)
TiO <sub>2</sub>	×	100	14 000 (3)	+450
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	×	10	> 30 000 (10)	- 55
Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	×	6,4	2 000 (10)	-60
MgTiO <sub>3</sub>	✓	17	20 000 (5)	-50
SrTiO <sub>3</sub>	✓	300	500 (3)	+1600
CaTi <sub>3</sub>	✓	170	1 500 (2)	+800
BaTi <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	×	38	10 000 (4)	4
Ba <sub>2</sub> Ti <sub>9</sub> O <sub>20</sub>	×	40	10 000 (4)	4
Ba(Sn,Mg,Ta)O <sub>3</sub>	✓	24	24 000 (10)	0 à 6
Ba(Mg,Ta,Sb)O <sub>3</sub>	✓	24	35 000 (10)	0 à 6
Ba(Zr,Zn,Ta)O <sub>3</sub>	✓	30	18 000 (10)	0 à 6

TABLE 1 – Liste de céramiques utilisées comme résonateurs diélectriques. Les huit premières ont un coefficient  $\tau_f$  important, indiquant une mauvaise stabilité en température. Les cinq suivantes sont des matériaux récents, produits par des industriels (Bell Labs, Raytheon, Temex, Murata), à  $\tau_f$  quasi-nul, donc très stables en température. Les structures Perovskites (structure cristalline de type ABO<sub>3</sub> ou AB'B''O<sub>3</sub> pour les perovskites complexes.) sont réputées pour avoir des permittivités relatives élevées par rapport aux autres céramiques, et surtout un facteur de qualité plus grand [56].

## 2.1 Le camouflage (*cloaking*)

Un métamatériau est une structure périodique composite sub-longueur d'onde permettant d'avoir des propriétés que l'on ne trouve pas dans la nature en ayant un contrôle sur la propagation des ondes dans ce milieu. Récemment, une nouvelle manière de contrôler la propagation d'une onde électromagnétique a vu le jour et porte le nom d'optique transformationnelle. Son formalisme est décrit dans l'article de référence de Pendry en 2006, où il explique comment, par une déformation progressive de l'espace, certaines zones peuvent être rendues invisibles pour une onde incidente. [61]. Cette méthode revient à « tordre » les ondes électromagnétiques, à la manière d'un mirage, au point de rendre une zone de l'espace non irradiée par cette onde, et donc invisible (et aveugle) (figure I.2.1). Changer les propriétés physiques d'un milieu afin de modifier l'espace lui-même avait déjà été abordé par André Nicolet dans un article de 1994, sans grande répercussion cependant [62]. Cette possibilité a également été discutée par Andrew Ward et John Pendry en 1996 via un article commun [63]. Discussion qui a entraîné cette fois-ci une étude théorique plus approfondie, l'article de Pendry *et al.* en 2006 et sa vérification expérimentale la même année en sont la concrétisation [61, 64]. John Pendry lui-même résume ces recherches sur le camouflage dans un article de 2009, riche en références [65].

Il faut cependant avoir à l'esprit que d'un point de vue strictement expérimental, la cape d'invisibilité (typiquement, à la manière d'Harry Potter), celle qui implique une transparence complète dans toutes les directions, n'existe pas. Le concept a fait l'objet d'importantes publications, une grande partie d'entre elles sont regroupées dans l'article de Pendry de 2009 déjà cité [65], mais on reste pour l'instant au stade de la recherche.

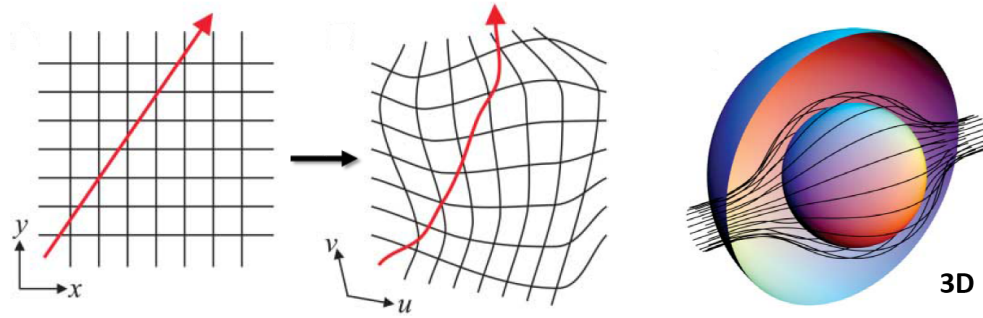


FIGURE I.2.1 – Schématisation du phénomène de camouflage, ou *cloaking*. À gauche le principe de l'optique transformationnelle, permettant de dévier un rayon lumineux ou équivalent en déformant le système de coordonnées cartésien dans lequel il se propage. À droite la représentation 3D de ce que serait un gradient d'indice artificiel capable de déformer les ondes électromagnétiques (traits noirs) par le principe de l'optique transformationnelle. Ceci permet de rendre des zones de l'espace invisible (sphère centrale) [61].

Il y a en réalité deux aspects dans le domaine du camouflage : la cape d'invisibilité (trois dimensions) et le tapis d'invisibilité, ou *carpet cloak* (deux dimensions). À l'heure actuelle, aucun dispositif à trois dimensions n'a été réalisé pour le camouflage, seule la technique du tapis d'invisibilité existe. C'est en novembre 2006 que David R. Smith de l'université de Duke montre pour la première fois la faisabilité de ce dispositif dans le domaine des micro-ondes [64], comme on le voit sur la figure I.2.2. Grâce à ce dispositif, une onde plane incidente ne voit pas son front d'onde modifié par la présence d'un objet au centre du tapis, comme cela devrait se passer normalement. Par une variation graduelle de l'indice de réfraction, l'onde se déforme puis se reforme progressivement, quasiment à l'identique en sortie de dispositif.

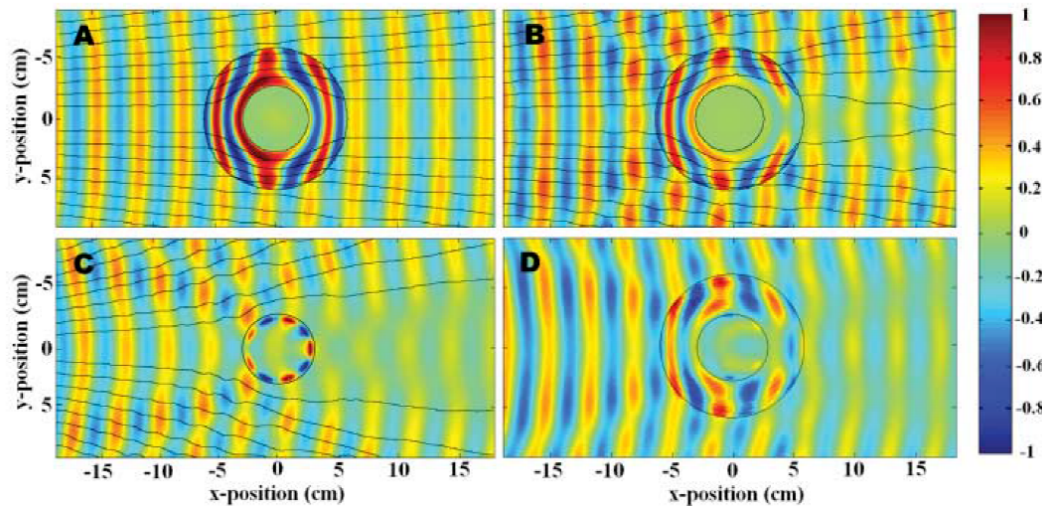


FIGURE I.2.2 – Vérification expérimentale par Smith *et al.* en 2006 de la cape d'invisibilité 2D. En A, la simulation de la cape avec des paramètres idéaux. En B, la simulation avec les paramètres réels du matériau. En C, sans la cape. En D, les mesures [64].

Dans ce domaine, J. Valentine a été le premier à montrer la faisabilité du *cloaking* dans le visible [47, 66]. Cependant, les structures microscopiques ne pouvaient camoufler que des structures elles aussi microscopiques. C'est en 2011 que le premier tapis d'invisibilité macroscopique dans le visible fut créé, grâce à l'utilisation d'un minéral particulier, la Calcite [67].

Notons que ce concept d'optique transformationnelle est transposable dans des domaines différents, comme en mécanique [68], en acoustique [69] ou en hydrodynamique [70]. On parlera dans ce cas de transformation d'espace. Les applications sont très diverses dans chaque domaine (système anti-sismique, anti-tsunami, anti-radars, anti-chaud, etc.) mais ont toutes pour point commun le contrôle de la propagation d'une onde (mécanique, acoustique, électromagnétique) dans un milieu. L'utilisation des métamatériaux dans la transformation d'espace est donc importante et relativement vaste.

## 2.2 Les lentilles parfaites ou super-résolutions

L'application la plus directe du phénomène de réfraction négative sont les lentilles dites « parfaites », parfois désignées par le terme super-lentilles en référence à la super-résolution. En effet, ces dispositifs permettent de dépasser la limite de résolution spatiale d'un système de mesure (de l'ordre de  $\lambda/2$ ) en descendant en-dessous de la limite de diffraction.

C'est John Pendry qui a montré en 2000 la faisabilité d'un tel dispositif [71], principe mis en application quatre ans plus tard conjointement avec Smith [72]. Le principe de fonctionnement de ces lentilles est schématisé sur la figure I.2.3. Par commodité nous utilisons les règles de l'optique géométrique (conditions LHI, milieu non-dispersif) pour appliquer la relation de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (\text{I.2.1})$$

Ainsi, partant d'un milieu de référence d'indice  $n_1$ , si une onde incidente arrive dans un milieu d'indice  $n_2 = -n_1$ , supposé sans perte, et adapté en impédance, elle se retrouve réfractée du même côté de la normale, à l'interface d'entrée comme à l'interface de sortie, avec le même angle puisque les indices sont égaux en valeur absolue. Ceci permet une focalisation en sortie de dispositif, l'appellation de « lentille » est appropriée.

Le plus intéressant concerne la partie évanescente de l'onde. Pour une onde plane classique, celle-ci est de la forme  $e^{-k \cdot r}$ , avec  $k$  le vecteur d'onde. Or, dans un milieu d'indice négatif, le signe change et on a une partie évanescente en  $e^{+k \cdot r}$ . On observe donc une amplification des ondes évanescentes, contrairement aux milieux classiques. Si bien que si les mesures sont effectuées en champ proche, l'image paraît plus nette, puisqu'il y a moins de pertes d'informations.



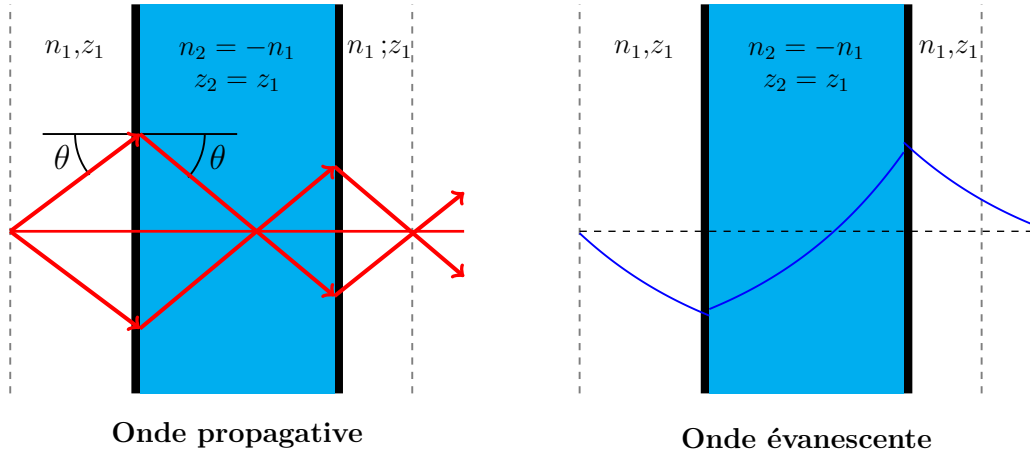


FIGURE I.2.3 – Schéma illustrant le fonctionnement d'une super-lentille. À gauche, le comportement de la partie propagatrice de l'onde, qui focalise en sortie. À droite, le comportement de la partie évanescente, qui se retrouve amplifiée dans un matériau d'indice négatif. L'impédance  $z$  est la même dans les deux milieux, seule l'indice  $n$  change de signe. En sortie, l'image est plus nette.

Une des premières expériences à avoir validé ce concept fut faite par Grbic *et al.*, en 2004, à l'aide d'un métamatériau à indice négatif en deux dimensions [73]. Les données, visibles sur la figure I.2.4, montrent l'amplification de l'onde évanescente dans le dispositif, comme sur le schéma de la figure I.2.3, ainsi qu'une résolution meilleure que la limite de diffraction. Plus tard, des super-lentilles fonctionnant à plus petite longueur d'onde furent fabriquées, offrant parfois des résolutions de l'ordre de  $\lambda/5$  [74].

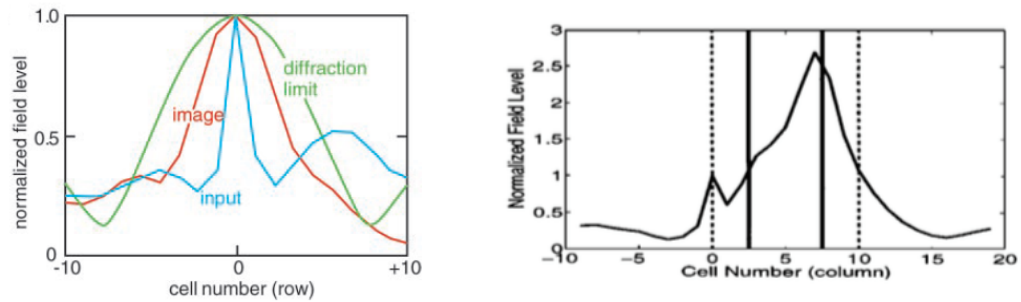


FIGURE I.2.4 – À gauche, l'amplitude du champ électrique mesuré à la source (en bleu) et en sortie (en orange) en fonction de son étalement spatial. On voit que la résolution de l'image est meilleure que la limite de diffraction, tracée en vert (Source image : Smith *et al.* [72] ; travaux de : Grbic *et al.*, 2004 [73]). À droite, la mesure de l'amplitude du champ électrique le long d'une ligne de propagation. Les lignes verticales pleines correspondent à la limite de la lentille, les lignes pointillées correspondent à la source (0) et à l'image (10). On voit que les ondes évanescentes sont amplifiées dans le métamatériau (Source : Grbic *et al.*, 2004 [73]).



### 2.3 La miniaturisation

Troisième application importante, les métamatériaux permettent une miniaturisation de la plupart des dispositifs classiques tels que les antennes, les guides d'ondes, les absorbants, les capteurs, etc. Sans trop rentrer dans les détails, nous présenterons ici deux exemples d'applications. La figure I.2.5 montre une antenne patch améliorée car posée sur une couche de métamatériau, à la perméabilité très supérieur à 1 car résonante. Les auteurs montrent que les dimensions de cette antenne sont réduites d'un facteur 3 à 6 par rapport à une antenne classique sans métamatériau [75]. A l'heure actuelle les antennes se font de plus en plus petites, jusqu'à atteindre des dimensions nanométriques. Suite au succès des ADM, on voit apparaître des dispositifs de nano-antennes « tout-diélectrique », qui rencontrent un intérêt croissant également [48].

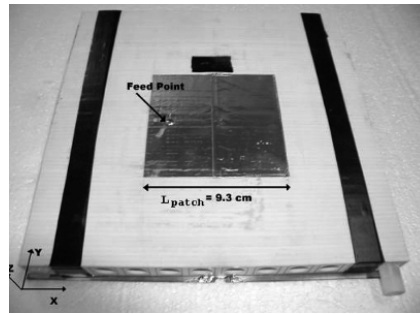


FIGURE I.2.5 – Photo d'une antenne patch miniaturisée grâce à une couche de métamatériau à la perméabilité améliorée. Le facteur de miniaturisation pour ce type d'antenne est de l'ordre de 3 à 6 selon la fréquence de travail (Buell *et al.*, 2014 [75])

Second exemple de miniaturisation : les absorbants. On voit sur la figure I.2.6 un cas d'absorbant en métamatériaux, fonctionnant aux infrarouges. L'épaisseur de l'absorbant en question est de l'ordre de 100 nm, soit 15 fois plus petit que la longueur d'onde du pic d'absorption, avec une efficacité d'absorption de l'ordre de 88% [76]. L'utilisation de métamatériaux permet dans ce cas précis de réduire considérablement les dimensions de l'absorbant tout en conservant une efficacité de fonctionnement élevée. Il a été montré que le fait d'avoir un métamatériau à la perméabilité résonante permet d'amplifier cette dernière ( $\mu_r \gg 1$ ) et ainsi de diminuer considérablement l'épaisseur d'un absorbant [77].

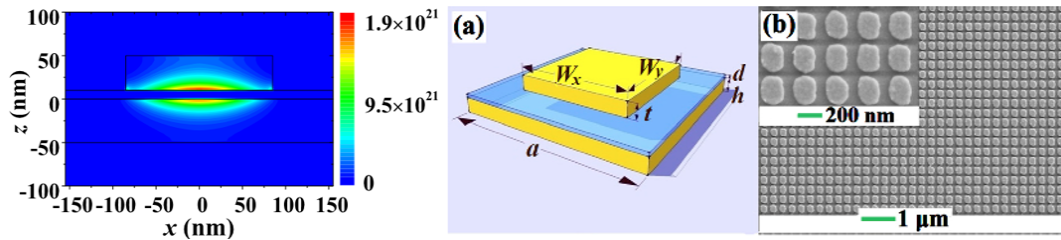


FIGURE I.2.6 – Exemple d'une couche d'absorbant par Hao *et al.* à base de métamatériau métallique, fonctionnant dans l'infrarouge. En plus d'une géométrie assez simple, l'épaisseur de la couche d'absorbant (en bleue sur la figure centrale) est 15 fois plus petite que la longueur d'onde du pic d'absorption, ce qui est pourtant suffisant pour avoir une absorption importante, avec une efficacité de près de 88% [76].

## 2.4 La sélectivité

De par leurs dimensions sub-longueur d'onde, les métamatériaux ont aussi un intérêt dans la fabrication de capteurs performants. Cette potentialité fut soulignée dès 1999 par Pendry [9]. Un exemple de cette sensibilité est illustré par les structures métalliques de Liu *et al.* en 2009 [78]. La rupture de symétrie dans les « atomes » de ce métamatériau permet l'apparition de modes de résonances supplémentaires, plus fins, donc plus précis. C'est grâce à la diminution de cette largeur en fréquence  $\Delta f$ , visible à droite sur la figure I.2.7, que l'on parle de meilleure sensibilité des métamatériaux, et donc, par extension, d'une meilleure sélectivité que les matériaux classiques, puisqu'ils distingueront deux fréquences là où d'autres n'en distingueront qu'une seule.

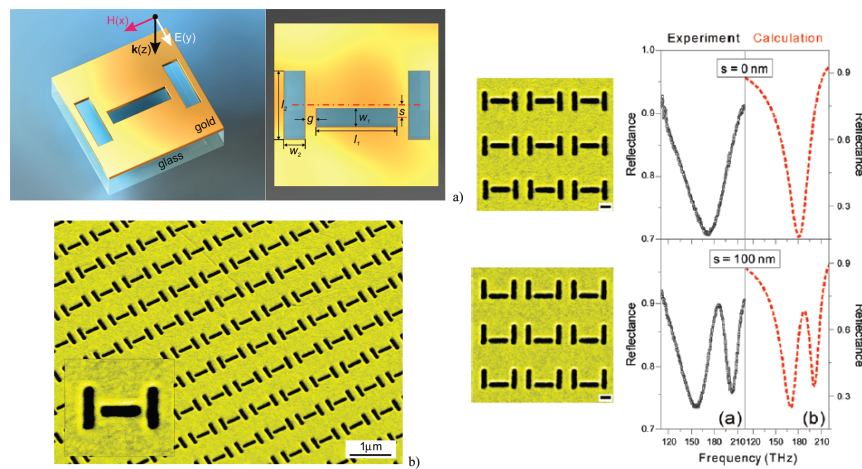


FIGURE I.2.7 – Exemple d'un métamatériau plan ayant une grande sensibilité en fréquence au THz, permettant de concevoir un capteur performant dans le visible. En jouant sur la position de la fente centrale, on brise la symétrie de la structure, faisant apparaître de nouveaux modes de résonances, plus fins (à droite), permettant une sensibilité importante (588 nm/RIU) et une bonne figure de mérite (3,8). Source : Liu *et al.*, 2010 [78].

## 3 Conclusion

Certes, il existe encore de nombreux obstacles avant de rendre les métamatériaux utilisables à grande échelle, pour des raisons de perfectionnement ou simplement de coût. Mais malgré ces barrières, on se rend compte, par ce bref aperçu, des possibilités énormes de ces structures, que ce soit dans le domaine de l'imagerie, de la miniaturisation, dans le contrôle des flux électromagnétiques, thermiques [79] et même mécaniques [68], leurs applications sont considérables, ce qui les rend chaque jour un peu plus indispensables à l'amélioration des technologies de demain.



## Chapitre II

# Propriétés électromagnétiques des métamatériaux

## Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Rappels de base</b>	<b>32</b>
1.1	Propagation des ondes dans le vide . . . . .	32
1.1.1	Relation de dispersion . . . . .	33
1.1.2	Vitesse de phase et vitesse de groupe . . . . .	34
1.2	Propagation des ondes dans les milieux matériels . . . . .	36
1.2.1	Relation de dispersion . . . . .	37
1.2.2	Vitesse de phase et vitesse de groupe . . . . .	39
1.3	Définition d'un indice négatif . . . . .	40
1.4	Propagation des ondes dans un milieu d'indice négatif . . . . .	41
1.5	Pourquoi faire des métamatériaux tout-diélectriques ? . . . . .	43
<b>2</b>	<b>Résonateurs diélectriques</b>	<b>45</b>
2.1	Modèle de Cohn . . . . .	45
2.2	Parallélépipède . . . . .	47
2.2.1	Cas général . . . . .	47
2.2.2	Pour des résonateurs 2D . . . . .	49
<b>3</b>	<b>Modélisation par éléments finis</b>	<b>50</b>
3.1	Pourquoi faire une analyse numérique ? . . . . .	50
3.2	Principe de la méthode des éléments finis . . . . .	50
3.3	Le logiciel HFSS . . . . .	52
3.3.1	Générer une structure 3D . . . . .	53
3.3.2	Appliquer les conditions aux limites et les conditions d'excitation . . . . .	54
3.3.3	Convergence du maillage . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Méthode d'extraction des paramètres effectifs</b>	<b>56</b>
4.1	Méthode NRW . . . . .	56
4.1.1	Coefficients de Fresnel et paramètres S . . . . .	57
4.1.2	Calcul de l'impédance et de l'indice . . . . .	58
4.2	Kramers-Kronig appliqué au choix de la branche . . . . .	58
4.2.1	Exemple dans la littérature : Szabo . . . . .	60
4.3	Application à des résonateurs diélectriques simples . . . . .	62
4.4	Limites de la précision HFSS . . . . .	64
4.4.1	Décomposition de l'impédance pour illustrer la précision . . . . .	68
4.5	Problématique de la bande de résonance . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>74</b>

---

La motivation de cette thèse est de montrer la possibilité d'un indice de réfraction négatif au térahertz avec des métamatériaux diélectriques. Nous venons de voir au chapitre I ce que sont les métamatériaux, nous verrons au chapitre III ce qu'implique le fait de travailler au térahertz. Dans ce chapitre II, nous expliquons ce qu'est un diélectrique et ce qu'on nomme « indice de réfraction négatif ». Pour cela, il est nécessaire de connaître le comportement d'une onde électromagnétique dans la matière, puis dans le cas particulier des diélectriques. Suite à cela, nous verrons comment se comporte une onde dans un milieu d'indice négatif, pour finalement expliquer comment des diélectriques permettent d'obtenir un tel milieu. Nous nous poserons aussi la question de la nécessité d'utiliser des diélectriques plutôt que des structures métalliques. Bien que la réponse à cette question fut évidente à une époque, elle l'est peut-être un peu moins aujourd'hui. Ce chapitre permet de revoir pas à pas toutes ces notions.

Dans un second temps nous aborderons brièvement le modèle de Cohn, puisqu'il nous a été utile pour prédire la position de nos résonances diélectriques. Les méthodes analytiques les plus courantes, comme celle de Maxwell Garnett, n'ont pas été utilisées au cours de cette thèse, c'est pourquoi elles ne seront présentées qu'en annexe. De manière générale, les modèles théoriques sont importants, puisqu'ils permettent d'apporter une explication physique à des résultats de mesures ou de simulations. Néanmoins, tous les modèles théoriques ont leur domaine de validité, et donc leurs limites.

Il est en effet toujours préférable d'utiliser des outils numériques pour prédire au mieux le comportement d'une structure. C'est pourquoi nous parlerons plus en détail, dans une troisième partie, de la modélisation par éléments finis. Nous terminerons, dans une quatrième partie, avec la méthode de traitement des données de simulation, autrement dit l'extraction des paramètres effectifs de nos structures. C'est une opération qui se révèle assez complexe dans notre cas, et qui représente un travail important de cette thèse.

## 1 Rappels de base

Cette section reprend les bases théoriques et les principes fondamentaux permettant de comprendre au mieux le comportement des ondes électromagnétiques dans la matière et dans les milieux d'indice négatif. Pour plus de détails, deux ouvrages font référence en théorie électromagnétique, celui de L.D. Landau (1984) [80] et celui de J.D. Jackson (1999) [81]. Concernant les milieux d'indice négatif, l'ouvrage de Ramakrishna et Grzegorzczak nous a inspiré en partie [82].

### 1.1 Propagation des ondes dans le vide

Le comportement de n'importe quelle onde électromagnétique (OEM) est décrit par seulement quatre équations fondatrices — cinq si l'on tient compte de la loi de Maxwell-Lorentz — que l'on nomme du nom de son fondateur : les équations de Maxwell. Elles sont à la base de l'électromagnétisme et décrivent l'interdépendance des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  d'une OEM. Plusieurs formulations existent pour les équations de Maxwell, ici sera présentée leur formulation la plus courante, celle vectorielle, aux dérivées partielles.

Dans le vide, c'est-à-dire en l'absence de charge et de courant, ces équations sont les suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II.1.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (\text{II.1.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{II.1.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{II.1.4})$$

où  $\mu_0$  et  $\epsilon_0$  sont respectivement la perméabilité et la permittivité du vide et sont des constantes. Chaque champ est un vecteur fonction de l'espace  $\mathbf{r}$  et du temps  $t$ . Pour obtenir l'équation de propagation du champ  $\mathbf{E}$ , on simplifie en éliminant  $\mathbf{B}$  des équations (II.1.3) et (II.1.4) et on obtient la relation suivante :

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (\text{II.1.5})$$

Sachant qu'il n'y a pas de charge électrique dans le vide (première équation de Maxwell :  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ ), on en déduit l'équation de propagation du champ électrique  $\mathbf{E}$  (dite équation de d'Alembert) dans le vide :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{II.1.6})$$

La même relation est obtenue pour l'induction magnétique  $\mathbf{B}$  en éliminant cette fois-ci  $\mathbf{E}$  des équations (II.1.3) et (II.1.4) :

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{II.1.7})$$

### 1.1.1 Relation de dispersion

Les solutions des équations d'onde (II.1.6) et (II.1.7) sont parfois très complexes. Cependant, les équations de Maxwell sont linéaires, toute solution peut donc être décomposée en une somme d'ondes planes, comme le veut le principe de superposition. Ainsi, en considérant une onde plane de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_0$  comme solution particulière de notre équation :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)} \quad (\text{II.1.8})$$

et en l'utilisant dans l'équation de propagation (II.1.6), on obtient :

$$k_0^2 \mathbf{E} + \epsilon_0 \mu_0 \omega_0^2 \mathbf{E} = 0 \quad (\text{II.1.9})$$

En simplifiant, on obtient la relation de dispersion suivante :

$$k_0^2 = \epsilon_0 \mu_0 \omega_0^2 \quad (\text{II.1.10})$$

Cette relation de dispersion permet de définir la vitesse des ondes électromagnétiques dans le vide, qui est précisément la célérité  $c$  de la lumière dans le vide :

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (\text{II.1.11})$$

Les valeurs respectives de  $\mu_0$  et  $\epsilon_0$  étant :  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \simeq 1.257 \cdot 10^{-6} \text{H.m}^{-1}$  et  $\epsilon_0 \simeq 8.854187 \cdot 10^{-12} \text{F.m}^{-1}$

### 1.1.2 Vitesse de phase et vitesse de groupe

Pour une onde plane monochromatique du type (II.1.8), si on cherche à connaître la vitesse de cette onde, il faut regarder un point sur celle-ci, à une phase donnée, et considérer que cette phase reste inchangée après un déplacement  $dr$  pendant une durée  $dt$ , soit en langage mathématique :

$$k_0 r - \omega_0 t = k_0 (r + dr) - \omega_0 (t + dt) \quad (\text{II.1.12})$$

Ce qui implique, en simplifiant l'équation, que :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\omega_0}{k_0} \quad (\text{II.1.13})$$

On appelle cette vitesse de propagation la *vitesse de phase* d'une onde. Elle se note  $v_\phi$  et d'après (II.1.10) elle vaut dans le vide :

$$v_\phi = \frac{\omega_0}{k_0} = c \quad (\text{II.1.14})$$

Cependant, une onde monochromatique ( $\omega$  unique) est une onde idéale qui dans la réalité n'existe pas. Une OEM est toujours composée de plusieurs fréquences  $\omega$ , ce qui peut se traduire par une largeur en fréquence  $\Delta\omega$ . Considérons dans ce cas notre OEM dans le vide (II.1.8) comme une superposition de plusieurs ondes, disons deux ondes pour simplifier le problème ( $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$ ), ayant pour fréquence  $\omega_1 = (\omega_0 + \Delta\omega_0)$  et  $\omega_2 = (\omega_0 - \Delta\omega_0)$ , où  $\Delta\omega_0 \ll \omega_0$ . Le nombre d'onde associé est respectivement  $k_1 = (k_0 + \Delta k_0)$  et  $k_2 = (k_0 - \Delta k_0)$ . Ainsi, on a :

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[k_1 \mathbf{r} - \omega_1 t]} \quad (\text{II.1.15})$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[k_2 \mathbf{r} - \omega_2 t]} \quad (\text{II.1.16})$$

Soit :

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[(k_0 + \Delta k_0)\mathbf{r} - (\omega_0 + \Delta\omega_0)t]} \quad (\text{II.1.17})$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[(k_0 - \Delta k_0)\mathbf{r} - (\omega_0 - \Delta\omega_0)t]} \quad (\text{II.1.18})$$

Si l'on réécrit différemment chacune des deux expressions, on trouve que :

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[(k_0 \mathbf{r} - \omega_0 t) + (\Delta k_0 \mathbf{r} - \Delta \omega_0 t)]} \quad (\text{II.1.19})$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[(k_0 \mathbf{r} - \omega_0 t) - (\Delta k_0 \mathbf{r} - \Delta \omega_0 t)]} \quad (\text{II.1.20})$$

On a donc deux termes de propagations :  $(k_0 \mathbf{r} - \omega_0 t)$  et  $(\Delta k_0 \mathbf{r} - \Delta \omega_0 t)$ , communs à ces deux ondes. Comme pour l'équation (II.1.12), si on détermine la vitesse d'un point de l'onde pour chacun de ces termes on a :

$$1. \quad k_0 r - \omega_0 t = k_0(r + dr) - \omega_0(t + dt)$$

On retrouve ici la vitesse de phase  $v_\phi$  de l'équation (II.1.14).

$$2. \quad \Delta k_0 r - \Delta \omega_0 t = \Delta k_0(r + dr) - \Delta \omega_0(t + dt)$$

On trouve ici que :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\Delta \omega_0}{\Delta k_0} \quad (\text{II.1.21})$$

On appelle cette vitesse de propagation la *vitesse de groupe* d'une onde. Elle se note  $v_g$  et d'après (II.1.10) elle vaut dans le vide :

$$v_g = \frac{\Delta \omega_0}{\Delta k_0} = c \quad (\text{II.1.22})$$

Ainsi, dans le vide, la vitesse de phase est une constante, comme la vitesse de groupe, et ces deux vitesses sont égales.

Nous sommes là dans un cas particulier, dans le cas général, ce n'est pas vrai du tout. La figure II.1.1 donne une représentation schématique de ces deux vitesses pour une OEM polychromatique. Nous verrons dans la partie suivante que pour un milieu dispersif, la vitesse de phase et la vitesse de groupe sont différentes. Dans un milieu d'indice négatif, ces deux vitesses sont même de signes opposés, nous le verrons plus en détail par la suite.

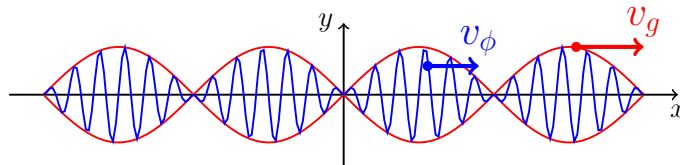


FIGURE II.1.1 – Représentation de la vitesse de groupe ( $\vec{v}_g$ ) et la vitesse de phase ( $\vec{v}_\phi$ ) d'une OEM polychromatique à une dimension, se propageant selon la direction  $\vec{O}x$ . La vitesse de groupe correspond à la vitesse de l'enveloppe (en rouge), la vitesse de phase à celle de l'onde porteuse (en bleu), à l'intérieur de cette enveloppe.



## 1.2 Propagation des ondes dans les milieux matériels

Dans un milieu autre que le vide, il existe des charges ponctuelles  $\rho$  ainsi que des courants  $\mathbf{J}$ . Les équations de Maxwell sont donc légèrement différentes de celles du vide :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II.1.23})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{II.1.24})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{J} \quad (\text{II.1.25})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{II.1.26})$$

De plus, du fait des charges et des courants qu'il contient, un milieu matériel va avoir tendance à se polariser (et se magnétiser dans le cas d'un matériau magnétique) sous l'effet d'une OEM incidente. Il faut alors tenir compte de sa polarisation  $\mathbf{P}$  (voir annexe A pour plus de détails sur la polarisation de la matière) et de son aimantation  $\mathbf{M}$ . Nous devons donc introduire deux nouvelles grandeurs, l'induction électrique  $\mathbf{D}$  et le champ magnétique  $\mathbf{H}$ , reliées à ces grandeurs par :

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (\text{II.1.27})$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} \quad (\text{II.1.28})$$

De la manière la plus générale possible, le lien entre  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{D}$  et les paramètres du milieu s'exprime via les relations constitutives suivantes :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\bar{\epsilon}}(\omega) & \bar{\bar{\zeta}}(\omega) \\ \bar{\bar{\xi}}(\omega) & \bar{\bar{\mu}}(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix}$$

où  $\bar{\bar{\epsilon}}(\omega)$ ,  $\bar{\bar{\zeta}}(\omega)$ ,  $\bar{\bar{\xi}}(\omega)$  et  $\bar{\bar{\mu}}(\omega)$  sont des tenseurs, représentant respectivement la permittivité du milieu, les deux composantes de transfert de polarisation, et la perméabilité du milieu. Ils dépendent de  $\omega$  si le milieu est dispersif, dans le cas contraire, ce sont des constantes.

En l'absence de transfert de polarisation, on considère les termes diagonaux comme nuls, donc  $\bar{\bar{\zeta}} = \bar{\bar{\xi}} = 0$ . De plus, si le milieu est homogène et isotrope,  $\bar{\bar{\epsilon}}$  et  $\bar{\bar{\mu}}$  ne sont plus des tenseurs, les relations constitutives deviennent scalaires :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix}$$

De fait, si on considère qu'il n'y a pas de courant ( $\mathbf{J} = 0$ ) et pas de charge ( $\rho = 0$ ) dans notre milieu, on retrouve les mêmes équations de Maxwell que dans la partie précédente, à ceci près que  $\epsilon_0$  et  $\mu_0$  sont remplacées par  $\epsilon$  et  $\mu$ , respectivement :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II.1.29})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (\text{II.1.30})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{II.1.31})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{II.1.32})$$

On en déduit l'équation de propagation du champ électrique  $\mathbf{E}$  dans un milieu matériel (le symétrique existe pour le champ  $\mathbf{B}$ ) :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{II.1.33})$$

On a le même type d'équation dans un milieu conducteur, puisqu'en présence de courant ( $\mathbf{J} \neq 0$ ), la conductivité  $\sigma$  dans ce milieu se définit comme :

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (\text{II.1.34})$$

Ainsi, en remplaçant  $\mathbf{J}$  par cette expression dans l'équation (II.1.25), on en déduit une permittivité généralisée  $\epsilon_{eq}$  du milieu :

$$\epsilon_{eq} = \frac{i\sigma}{\omega} + \epsilon \quad (\text{II.1.35})$$

où  $\epsilon$  est la permittivité du milieu considéré ( $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$ ) et  $\omega$  la fréquence de l'OEM incidente.

On a donc :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu\epsilon_{eq} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{II.1.36})$$

### 1.2.1 Relation de dispersion

Pour définir la relation de dispersion dans un milieu matériel, on utilise une onde plane monochromatique similaire à celle de l'équation (II.1.8) comme solution particulière de l'équation de propagation II.1.33 :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad (\text{II.1.37})$$

L'équation de dispersion devient dans ce cas :

$$k^2 = \omega^2 \epsilon \mu \quad (\text{II.1.38})$$

Dans les matériaux réels, en raison des pertes, ces grandeurs sont complexes. Ceci nous amène à définir l'indice de réfraction autrement que par son expression courante, celle de l'équation (II.1.48). Pour cela, on peut partir de sa définition le reliant aux vecteurs d'onde :

$$n = \frac{k}{k_0} \quad (\text{II.1.39})$$

En prenant en considération les relations de dispersions en (II.1.10) et (II.1.38), on constate que :

$$n^2 = \frac{k^2}{k_0^2} = \frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0} = \epsilon_r\mu_r$$

On obtient ainsi une nouvelle définition de l'indice, uniquement à partir des paramètres  $\epsilon_r$  et  $\mu_r$  du milieu matériel :

$$n^2 = \epsilon_r\mu_r \quad (\text{II.1.40})$$

Dans les matériaux usuels, la permittivité relative  $\epsilon_r$  et la perméabilité relative  $\mu_r$  sont complexes, en raison des pertes, et possèdent des parties réelles positives, il n'y a donc aucune ambiguïté sur le signe de l'indice. Mais dans le cas d'un métamatériau où ces deux grandeurs sont négatives simultanément, il y en a une. En effet, à la vue de cette équation, ce n'est pas évident que pour  $\mu_r < 0$  et  $\epsilon_r < 0$  on obtienne  $n < 0$ . Pour bien le comprendre, il faut se placer dans le plan complexe, comme on le voit sur la figure II.1.2, dans lequel on a :

$$\epsilon_r = |\epsilon_r|e^{i\theta_\epsilon} \quad \text{et} \quad \mu_r = |\mu_r|e^{i\theta_\mu} \quad (\text{II.1.41})$$

Dans ce cas l'indice de réfraction devient :

$$n = \sqrt{|\epsilon_r||\mu_r|}e^{i\frac{1}{2}(\theta_\epsilon+\theta_\mu)} \quad (\text{II.1.42})$$

Comme nos milieux sont considérés comme passifs, les parties imaginaires de  $\epsilon_r$  et  $\mu_r$  sont forcément positives, ce qui impose que  $\theta_\epsilon \in [0, \pi]$  et  $\theta_\mu \in [0, \pi]$ . De fait, l'angle de l'indice de réfraction  $n$  appartient au même domaine :  $(\theta_\mu + \theta_\epsilon)/2 \in [0, \pi]$ . Dans le cas d'un milieu doublement négatif, où les parties réelles de  $\epsilon_r$  et  $\mu_r$  sont négatives simultanément, le domaine de définition de l'angle se réduit à  $[\pi/2, \pi]$  pour  $\epsilon_r$ , pour  $\mu_r$  et pour  $n$ . On a donc bien une partie réelle de l'indice  $n$  négative pour  $Re(\epsilon_r) < 0$  et  $Re(\mu_r) < 0$ . C'est encore plus évident si l'on se place dans le cas limite sans perte, il suffit de faire tendre  $\theta_\epsilon$  et  $\theta_\mu$  vers  $\pi$ . On obtient ainsi, pour l'indice :

$$n = \sqrt{|\epsilon_r||\mu_r|}e^{i\pi} \quad (\text{II.1.43})$$

ce qui est équivalent à dire que :

$$n = -\sqrt{|\epsilon_r||\mu_r|} \quad (\text{II.1.44})$$

Pour éviter toute ambiguïté possible sur l'existence d'un indice négatif, voyons maintenant comment définir autrement un milieu d'indice négatif, non via les paramètres relatifs du milieu, mais à partir de la vitesse de groupe  $v_g$  et de la vitesse de phase  $v_\phi$  de l'onde incidente.

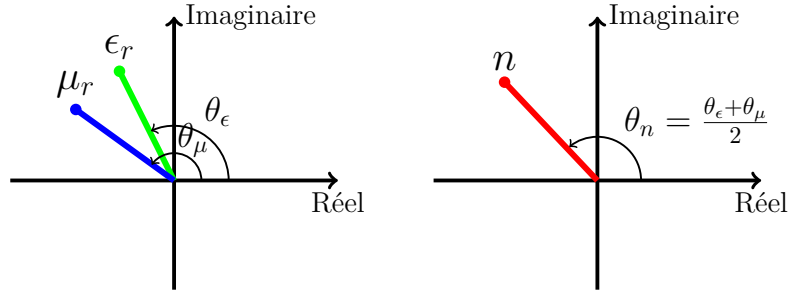


FIGURE II.1.2 – Représentation dans le plan complexe de la permittivité relative  $\epsilon_r$  et de la perméabilité relative  $\mu_r$  lorsque leurs parties réelles sont négatives (à gauche) et l'indice de réfraction  $n$  qui en découle dans cette configuration (à droite). Nos matériaux sont passifs, c'est pourquoi la partie angulaire est dans le partie supérieure du plan complexe :  $\theta_n, \theta_\epsilon, \theta_\mu \in [0, \pi]$ . On comprend mieux dans ce cas pourquoi  $Re(n) < 0$  si  $Re(\epsilon_r) < 0$  et  $Re(\mu_r) < 0$  [82].

### 1.2.2 Vitesse de phase et vitesse de groupe

Dans un milieu matériel avec perte,  $\mathbf{k}$  est complexe. La partie imaginaire n'ayant qu'un effet d'atténuation sur l'amplitude, seule la partie réelle de  $\mathbf{k}$  est à prendre en compte pour définir la vitesse de phase, soit d'après la relation de dispersion (II.1.38) :

$$v_\phi = \frac{\omega}{Re(k)} = \frac{1}{Re(\sqrt{\epsilon_r \mu_r})} = \frac{c}{Re(n)} \quad (\text{II.1.45})$$

Ainsi, on voit que la vitesse de phase est liée directement à la partie réelle de l'indice de réfraction. Si le signe de la partie réelle de  $n$  est négatif, alors la vitesse de phase est négative. Cette vitesse n'est d'ailleurs plus une constante puisque, hors approximation, l'indice de réfraction n'est jamais constant, les milieux matériels étant toujours dispersifs. Il en découle que la vitesse de phase n'est plus égale à la vitesse de groupe, puisque :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(kv_\phi)}{dk} = v_\phi + k \frac{dv_\phi}{dk} \quad (\text{II.1.46})$$

On appelle cette relation la relation de Rayleigh [83]. Hors cas limite (forte absorption, etc.), comme le rappelait Sommerfeld dans le même ouvrage, un milieu dispersif signifie que :

$$\frac{dv_\phi}{dk} < 0 \quad (\text{II.1.47})$$

donc d'après (II.1.46) on a forcément  $v_g < v_\phi$ .

Les relations (II.1.45) et (II.1.46) nous montrent finalement qu'un milieu d'indice négatif implique une vitesse de phase négative pour une OEM dans ce milieu, ce qui nous amène à une nouvelle définition de l'indice de réfraction.

### 1.3 Définition d'un indice négatif

On a longtemps défini l'indice de réfraction de manière assez simple, c'est avant tout le rapport de la célérité de la lumière dans le vide sur la célérité de la lumière dans le milieu considéré :

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{II.1.48})$$

A première vue donc, un indice de réfraction est toujours positif et supérieur (ou égal) à 1. Cependant, la vitesse d'une OEM a plusieurs définitions, puisqu'on distingue dans la partie précédente la vitesse de phase de la vitesse de groupe. Dans ce cas, la question qui vient naturellement est : quelle vitesse prendre pour définir l'indice de réfraction ? La formule (II.1.45) nous donne un début de réponse : quand l'indice de réfraction est négatif, la vitesse de phase est négative. Mais est-ce suffisant ? D.R. Smith montrait que dans les matériaux usuels, la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont parallèles, et à l'inverse, anti-parallèles lorsque la permittivité et la perméabilité sont négatives simultanément [72], on parle dans ce cas de milieu doublement négatif, ou DNG (pour *Double-NeGative media*).

Les travaux de Dolling *et al.* en 2006, visibles sur la figure II.1.3, viennent relativiser cette affirmation. Ils montrent en effet que la vitesse de phase et la vitesse de groupe peuvent être, sur une courte gamme de fréquence, simultanément négatives [84]. On peut raisonnablement penser, suite à ces travaux, qu'une vitesse de phase négative confirme la présence d'un indice négatif (graphique C sur la figure II.1.3), que la vitesse de groupe soit positive ou non. En réalité cela montre, comme l'affirmait Brillouin pour les matériaux à indice positif [83], qu'il n'y a pas nécessairement de relation entre la vitesse de phase et la vitesse de groupe. Il rappelle aussi qu'une absorption trop importante fait perdre son sens physique à la notion de vitesse de groupe.

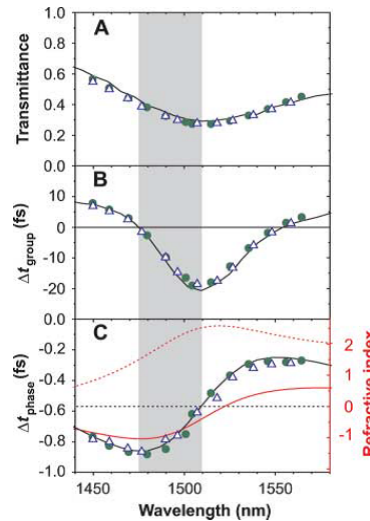


FIGURE II.1.3 – Mesures de la transmission, du retard de groupe et du retard de phase pour un métamatériau métallique de dimension nanométrique. En rouge, la partie réelle et imaginaire de l'indice de réfraction. La zone grisée correspond à la gamme de fréquence où le retard de phase et le retard de groupe sont simultanément négatifs [84].

Ainsi, l'ambiguïté sur le signe de la formule (II.1.40) est levée : la présence d'une vitesse de phase négative est une conséquence d'un milieu d'indice négatif. C'est la manifestation physique des considérations théoriques de Veselago énoncées en 1968 [2]. La mesure de cette vitesse de phase est actuellement une méthode de confirmation de la présence d'un indice négatif, nous le verrons plus loin avec un exemple.

## 1.4 Propagation des ondes dans un milieu d'indice négatif

En partant des équations de Maxwell de la partie 1.2 et en considérant  $\epsilon$  et  $\mu$  négatifs, on peut déjà avoir une idée de la manière dont le champ électromagnétique se comporte dans un milieu d'indice négatif. Considérons l'onde plane (II.1.37) et réécrivons les équations (II.1.31) et (II.1.32) dans le domaine fréquentiel. On a :

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\omega\epsilon\mathbf{E} \quad (\text{II.1.49})$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{B} \quad (\text{II.1.50})$$

où  $\omega$  est la fréquence de l'onde plane incidente,  $\epsilon$  et  $\mu$  la permittivité et la perméabilité du milieu, respectivement. Les vecteurs  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{k}$  sont orthogonaux et forment un trièdre direct. Or, d'après les équations ci-dessus, si  $\epsilon$  et  $\mu$  sont négatifs simultanément,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{k}$  ne forment plus un trièdre direct, mais indirect. En prenant la définition du vecteur de Poynting  $\mathbf{S}$  comme :

$$\mathbf{S} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mu_0} \quad (\text{II.1.51})$$

alors le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  pointe dans la direction opposée au vecteur de Poynting  $\mathbf{S}$ , comme l'illustre le schéma de la figure II.1.4.

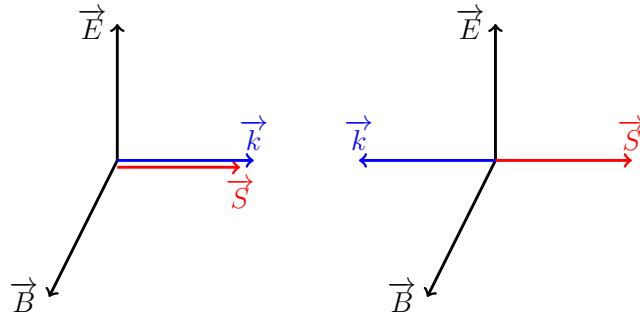


FIGURE II.1.4 – A gauche : le trièdre  $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{k})$  est direct. Dans le cas d'un matériau normal,  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{S}$  sont parallèles. A droite : le trièdre  $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{k})$  n'est plus direct. Dans un métamatériau à indice négatif,  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{S}$  sont anti-parallèles. D'où le terme parfois de « matériau main gauche » pour ce type de matériaux, puisque le trièdre s'obtient avec les premiers doigts de la main gauche.

En conséquence, dans un milieu doublement négatif, si l'onde arrive avec un angle d'incidence non nul, d'après la loi de Snell-Descartes (I.2.1) la réfraction a lieu du même côté de la normale, contrairement aux matériaux usuels. On le voit sur la Figure II.1.5 qui reprend les résultats de mesures de Smith *et al.* sur un prisme, l'un constitué d'un matériau main gauche ( $n = -2,7$ ) et l'autre de Teflon ( $n = 1,4$ ) [72]. C'est une manière expérimentale permettant de vérifier la présence d'un indice négatif.

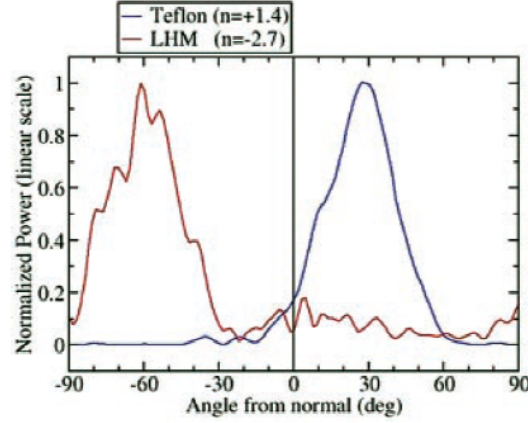


FIGURE II.1.5 – Puissance normalisée d'une onde réfractée en fonction de l'angle en sortie. L'onde incidente arrive sur la face plate du prisme, n'est pas déviée, mais est réfractée en sortie. La mesure de l'angle réfracté permet de remonter à l'indice *effectif* du milieu, connaissant l'angle incident. En bleu, le résultat pour un échantillon de Teflon, l'onde est réfractée de l'autre côté de la normale : l'indice est positif. En rouge, l'onde est réfractée du même côté de la normale : l'indice est négatif [72].

Comme vu dans la partie 1.3, la mesure de la vitesse de phase d'une onde est une méthode de vérification d'un milieu doublement négatif. La Figure II.1.6 reprend un résultat de la littérature montrant la variation de la phase à travers un métamatériau pour trois fréquences différentes [85]. Ce métamatériau est composé d'un réseau périodique de SRR et de résonateurs électriques LC (notés ELC) à base de cuivre, de dimensions millimétriques, et résonne dans la bande X entre 8 et 12 GHz. On remarque un décalage inverse de la phase (une variation croissante, graphe du milieu sur la Figure II.1.6) lorsque l'on se trouve dans une zone où l'indice est négatif, ce qui n'est pas le cas dans les deux autres graphiques, lorsque l'indice est positif.

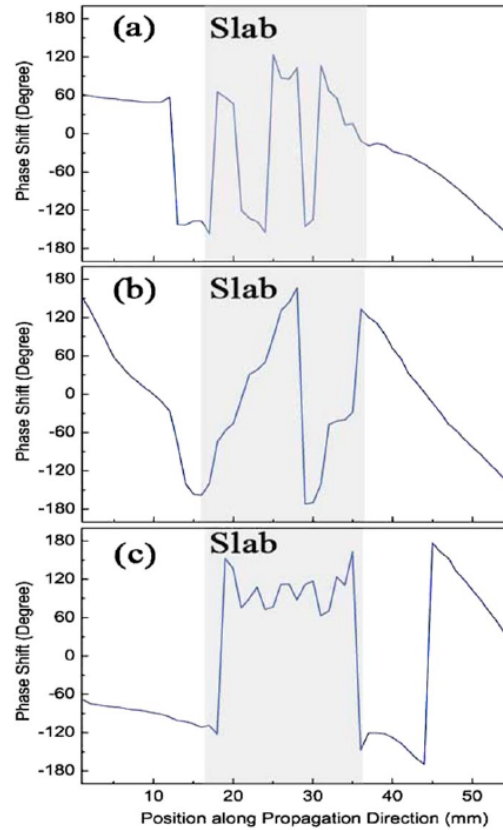


FIGURE II.1.6 – Variation de la phase de l'onde selon la direction de propagation, pour trois fréquences différentes (de haut en bas) : 10,4 GHz, 11,24 GHz et 11,96 GHz. En grisé, le métamatériau. Pour la première fréquence, l'indice est positif. On a une phase crénelée à cause d'une mauvaise adaptabilité de l'impédance, un régime d'ondes stationnaires se met en place. Pour la seconde fréquence, l'indice est négatif, la variation de la phase change de signe. Pour la troisième fréquence, l'indice dans le métamatériau est proche de zéro, d'où une variation quasi-nulle de la phase [85].

## 1.5 Pourquoi faire des métamatériaux tout-diélectriques ?

Comme vu dans le chapitre I, les premières fabrications de métamatériaux ont d'abord consisté à utiliser des structures métalliques. Les fils métalliques dilués permettaient une réponse électrique négative, et les SRR métalliques permettaient une réponse magnétique négative. Ce concept des SRR fonctionne d'ailleurs très bien au gigahertz comme au proche infrarouge [23]. Cependant, les fortes pertes ohmiques des métaux représentaient un frein non négligeable, d'autant plus contraignant si l'on se rapprochait de l'optique, sans compter les difficultés de fabrication des SRR aux petites dimensions. Il fallait donc trouver une alternative aux SRR, et celle-ci est venue des diélectriques. Pendry *et al.* s'est en effet rendu compte dès 2002, en étudiant des cristaux photoniques métallo-diélectriques, que des inclusions diélectriques dans un milieu hôte permettaient l'apparition de résonances de type électrique et de type magnétique [27, 28]. Combinées, ces résonances permettent d'avoir un milieu doublement négatif, comme on le voit sur la Figure II.1.7.



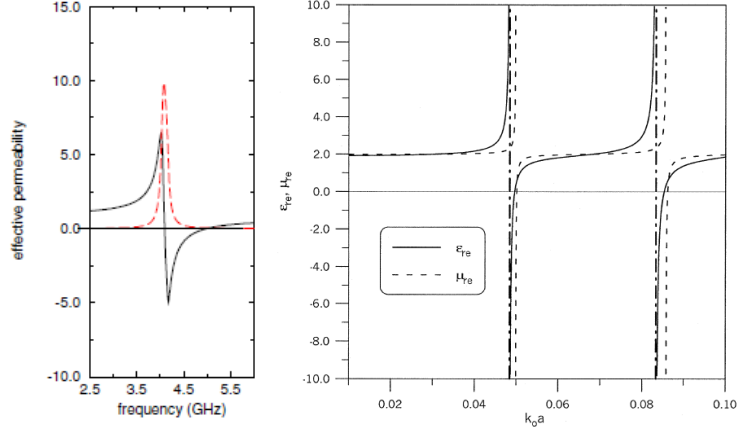


FIGURE II.1.7 – A gauche, la perméabilité effective résonante d'un cristal photonique ( $\epsilon = 200 + 5i$ ) de dimension millimétrique [27]. A droite, la permittivité et la perméabilité effective résonante de particules sphériques de rayon  $a$  [28]. Dans les deux cas, le caractère résonant permet d'avoir des valeurs négatives des paramètres effectifs.

Plus tard, vers 2008-2009, les équipes de Schuller *et al.* et Gerard *et al.* ont montré la possibilité d'atteindre le domaine du visible avec ce type de matériaux, en proposant des nanoparticules sphériques diélectriques [86, 87], toujours sur le principe d'un fort confinement du champ dans les résonateurs, associé à un fort courant de déplacement à l'intérieur de ceux-ci. En effet, deux types de courants sont à l'origine d'un champ électromagnétique : les courants de conduction ( $\mathbf{J}_c$ ) et les courants de déplacement ( $\mathbf{J}_d$ ) [88], dont la formulation classique est :

$$\mathbf{J}_c = \sigma \mathbf{E} \quad (\text{II.1.52})$$

$$\mathbf{J}_d = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{II.1.53})$$

avec  $\sigma$  la conductivité et  $\epsilon$  la permittivité du milieu considéré. Par commodité, ces formulations ne tiennent pas compte de la polarisation  $\mathbf{P}$  dans le diélectrique.

Dans les diélectriques, en l'absence de porteurs libres, donc avec une conductivité faible, le courant de déplacement excède de beaucoup le courant de conduction ( $\|\mathbf{J}_c\| \ll \|\mathbf{J}_d\|$ ). Mais surtout, ce courant de déplacement augmente d'autant plus que la permittivité relative  $\epsilon_r$  du diélectrique est élevée. Si ce courant est suffisamment élevé, et que la géométrie permet un bon confinement du champ, on voit émerger des résonances de Mie [26]. Dans des conditions précises que nous décrirons au chapitre III, une résonance dipolaire électrique et une résonance dipolaire magnétique sont possibles. La réponse dipolaire magnétique est illustrée sur la figure II.1.8 pour une particule sphérique, montrant un comportement analogue au cas du SRR métallique de Pendry [48].

Ainsi, une sphère diélectrique a une réponse analogue à celle d'un SRR métallique, mais une tige diélectrique a également une réponse analogue à celle d'un fil métallique [89]. Les diélectriques ont de plus l'avantage de ne pas avoir de pertes ohmiques et sont également plus faciles à fabriquer aux petites dimensions, grâce à leurs géométries simples (nous relativiserons ces avantages au chapitre IV). Ces matériaux sont donc devenus de très bons candidats pour obtenir des indices négatifs, à haute comme à basse

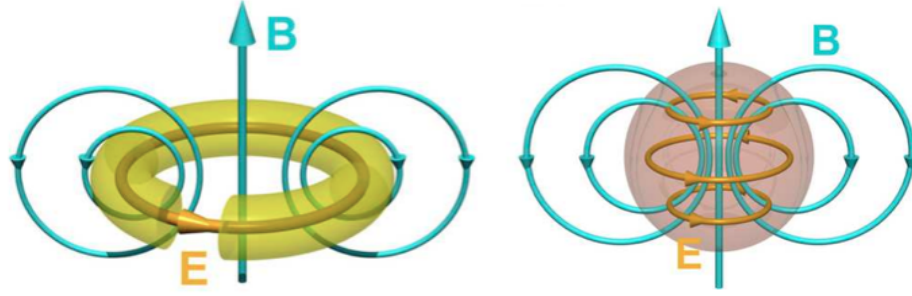


FIGURE II.1.8 – Schéma du comportement des champs électrique et magnétique en interaction avec un SRR, comme le décrivait Pendry [9] (à gauche) et celui d'une particule diélectrique de haute permittivité à la résonance magnétique, comme le décrit la théorie de Mie [26] (à droite). On voit que le comportement du champ magnétique est similaire dans les deux cas. Source des images : Krasnok *et al.* [48].

fréquence [34,45,46]. Ils attirent également des chercheurs de domaines connexes comme les cristaux photoniques, dont les similitudes entre ces deux domaines sont importantes [90].

Nous allons voir maintenant un modèle très utilisé dans cette thèse pour prédire la position des différents modes de résonances de nos structures. Nous aborderons ensuite les outils numériques utilisés pour confirmer (ou non) la prédiction de ce modèle.

## 2 Résonateurs diélectriques

Un objet diélectrique ayant une permittivité suffisamment élevée pour confiner les champs électriques et magnétiques à l'intérieur de lui-même va avoir un caractère résonant. On peut ainsi définir des modes propres et des fréquences propres en fonction de sa composition et de la géométrie de sa structure.

Il existe de nombreux modèles pour décrire les modes propres d'un résonateur diélectrique, comme celui de Itoh et Rudokas [91] ou celui de Cohn [55]. Nous allons parler ici uniquement du modèle de Cohn car il est relativement simple à décrire et ses équations sont faciles à utiliser. Il a en effet permis de prédire, avec une bonne précision ( $\pm 1\%$  à faible couplage), la position en fréquence des résonances de Mie dans nos structures. Les résultats de simulations sont visibles dans le chapitre IV. Néanmoins, comme tout modèle, il a ses limites, puisqu'il ne s'applique qu'aux résonateurs isolés.

### 2.1 Modèle de Cohn

Une des premières approximations pour décrire un résonateur diélectrique est de considérer que les parois du résonateur sont des conducteurs magnétiques parfaits, ou PMC (*Perfect Magnetic Conductor*). Par définition, une condition PMC, et par symétrie une condition PEC (*Perfect Electric Conductor*), se décrivent ainsi :

$$PMC : \begin{cases} \mathbf{n} \times \mathbf{H} = 0 \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{E} = 0 \end{cases} \quad (\text{II.2.1})$$

$$PEC : \begin{cases} \mathbf{n} \times \mathbf{E} = 0 \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (\text{II.2.2})$$

où  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal à la surface.

Le modèle proposé par Cohn en 1968 considère que seules certaines parois sont assimilables à des PMC [55]. Dans ce modèle, un résonateur est dans un guide d'onde, sous la fréquence de coupure, et seules ses parois latérales sont assimilables à des PMC, comme on le voit sur la figure II.2.1. En dehors du résonateur, le champ est évanescent et décroît exponentiellement à partir de chaque interface. Tel que représentées sur cette figure, les conditions PMC font que le champ  $\mathbf{H}$  est dans la direction  $z$ , et le champ  $\mathbf{E}$  dans la direction  $y$ , ce qui signifie que nous sommes en polarisation *Transverse Electrique* (TE) : le champ  $\mathbf{E}$  est perpendiculaire au plan d'incidence (en rouge).

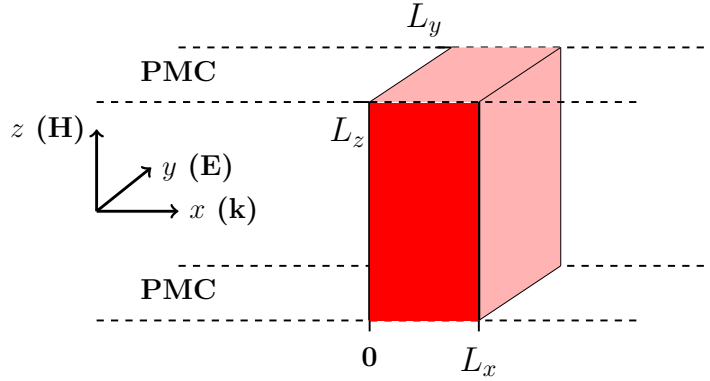


FIGURE II.2.1 – Représentation schématique 3D du modèle de Cohn pour un parallélépipède de dimension  $L_x \times L_y \times L_z$ . Les pointillés désignent les limites du guide d'onde PMC, les parois ouvertes sont en trait plein. La polarisation est définie par le trièdre  $(\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{H})$  où  $\mathbf{k}$  est selon  $x$ ,  $\mathbf{E}$  selon  $y$ , et  $\mathbf{H}$  selon  $z$  : nous sommes en polarisation TE.

Il existe des formes très différentes de résonateurs (disques, anneaux, cylindres, parallélépipèdes, etc.), ayant tous leurs avantages et leurs inconvénients. Les disques sont par exemple très utilisés dans le domaine des micro-ondes [92]. Ici, nous décrirons uniquement les modes dans un résonateur à section rectangulaire, par extension parallélépipédique, puisqu'il s'agit des résonateurs que nous avons principalement utilisés au cours de cette thèse. Pour plus de détails sur les modèles et autres aspects des résonateurs diélectriques, l'ouvrage de Kajfez et Guillon fait office de référence [93].

## 2.2 Parallélépipède

### 2.2.1 Cas général

Les résonateurs parallélépipédiques sont principalement utilisés pour leur facilité de fabrication, ils restent très utilisés encore aujourd'hui [37, 42, 45, 94–96].

Comme décrites précédemment, les parois latérales sont considérées comme des PMC. Pour connaître les résonances d'un parallélépipède de dimension  $L_x \times L_y \times L_z$ , il faut partir de l'équation de propagation des ondes (II.1.33) à l'intérieur du résonateur et en chercher les solutions harmoniques, notées  $\mathbf{U}$ , dans les trois directions de l'espace ( $x$ ,  $y$  et  $z$ ) [97]. Ces solutions sont de la forme :

$$\mathbf{U}(x, y, z, t) = \mathbf{u}(x, y, z)e^{-i\omega t} \quad (\text{II.2.3})$$

L'équation d'onde (II.1.33) devient alors :

$$\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{u} = 0 \quad (\text{II.2.4})$$

En utilisant le principe de séparation des variables, le Laplacien peut s'écrire<sup>3</sup> :

$$\nabla^2 \mathbf{u} = u_x''(x)u_y(y)u_z(z) + u_x(x)u_y''(y)u_z(z) + u_x(x)u_y(y)u_z''(z) \quad (\text{II.2.5})$$

où  $u''$  désigne la dérivée seconde de la solution harmonique. On peut donc réécrire l'équation d'onde (II.2.4) comme :

$$\frac{u_x''}{u_x} + \frac{u_y''}{u_y} + \frac{u_z''}{u_z} + \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad (\text{II.2.6})$$

On peut résoudre chaque terme de la somme indépendamment, le premier nous impose de trouver une solution  $C_x$  selon  $x$  tel que :

$$\frac{u_x''}{u_x} = -C_x \quad (\text{II.2.7})$$

de même on cherche une solution  $C_y$  selon  $y$  pour le deuxième terme, et une solution  $C_z$  selon  $z$  pour le troisième terme. L'équation (II.2.7) est celle d'un oscillateur harmonique dont les solutions générales sont connues. On a, selon le signe de  $C_x$  :

$$\begin{cases} u_x(x) = A \cosh x\sqrt{-C_x} + B \sinh x\sqrt{-C_x} & \text{si } C_x < 0 \\ u_x(x) = A \cos x\sqrt{C_x} + B \sin x\sqrt{C_x} & \text{si } C_x > 0 \end{cases} \quad (\text{II.2.8})$$

---

3. Par commodité on utilise ici les notation  $Re(u) = u'$  et  $Im(u) = u''$

où A et B sont des constantes à déterminer selon les conditions aux limites et les conditions initiales. Encore une fois, on a les mêmes solutions selon  $y$  et  $z$ , nous ne les énoncerons pas ici.

Pour la direction  $x$ , sachant que le champ est nul sur les parois du guide, les conditions aux limites sont :

$$u'_x(x) = 0 \quad \text{pour} \quad x = 0 \quad \text{et} \quad x = L_x \quad (\text{II.2.9})$$

La condition en  $x = 0$  impose que la constante B des solutions (II.2.8) soit nulle. De plus, la solution donnée pour  $C_x < 0$  ne permet pas d'avoir  $u'_x(x)$  nul en  $x = L_x$  (sauf si A est nul bien sûr, mais dans ce cas il n'y a plus de solution harmonique). La seule solution valable est donnée pour  $C_x > 0$  :

$$u_x(x) = A \cos x\sqrt{C_x} \quad (\text{II.2.10})$$

avec  $C_x = k_x^2$  et A une constante liée à la condition initiale. Cela nous donne des solutions du type :

$$u_x(x) = A \cos xk_x \quad (\text{II.2.11})$$

avec

$$k_x = \frac{n_x\pi}{L_x} \quad (\text{II.2.12})$$

et  $n_x$  un entier.

En appliquant le même raisonnement pour  $u_y$  et  $u_z$  on aboutit à :

$$\mathbf{u}(x, y, z) = u_0 \cos x.k_x \cos y.k_y \cos z.k_z \quad \text{avec} \quad k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 \quad (\text{II.2.13})$$

Les solutions sont donc de la forme :

$$\mathbf{u}(x, y, z) = u_0 \cos x\frac{n_x\pi}{L_x} \cos y\frac{n_y\pi}{L_y} \cos z\frac{n_z\pi}{L_z} \quad (\text{II.2.14})$$

On en déduit une expression générale de  $k$  :

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2} \quad (\text{II.2.15})$$

Ce qui signifie que les fréquences de résonances d'un parallélépipède de dimension  $L_x \times L_y \times L_z$  et d'indice de réfraction  $n_p$  sont données par :

$$\omega_{mnp} = \frac{c}{n_p} \sqrt{\left(\frac{m\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{p\pi}{L_z}\right)^2} \quad (\text{II.2.16})$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière,  $n_p$  l'indice de réfraction du parallélépipède ( $n_p = \sqrt{\mu_r \epsilon_r}$ ) et  $m$ ,  $n$  et  $p$  des entiers qui définissent le mode de la résonance.

### 2.2.2 Pour des résonateurs 2D

Dans notre cas particulier de résonateurs « 2D » (une des dimensions est considérée comme très grande par rapport aux deux autres) à section rectangulaire  $L_x \times L_y$ , il suffit de faire tendre  $L_z$  vers l'infini (voir figure II.2.1) pour trouver les modes associés :

$$\omega_{mn} = \frac{c}{\sqrt{\mu_r \epsilon_r}} \sqrt{\left(\frac{m\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2} \quad (\text{II.2.17})$$

où  $\mu_r$  et  $\epsilon_r$  sont la perméabilité et la permittivité relatives du milieu. Écrit en fréquentiel, et considérant notre milieu comme non magnétique ( $\mu_r = 1$ ), on a :

$$f_{mn} = \frac{c}{2\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{\left(\frac{m}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n}{L_y}\right)^2} \quad (\text{II.2.18})$$

En polarisation TE, pour un résonateur de section carrée ( $L_x = L_y$ ), le premier mode est le mode  $TE_{11}$ , c'est un mode magnétique, comme le décrit la théorie de Mie [26]. Son expression est :

$$TE_{11} = \frac{c}{2\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{\left(\frac{1}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{1}{L_y}\right)^2} \quad (\text{II.2.19})$$

Le second est le mode  $TE_{12}$ , c'est un mode électrique :

$$TE_{12} = \frac{c}{2\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{\left(\frac{1}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{2}{L_y}\right)^2} \quad (\text{II.2.20})$$

Pour un résonateur à section carrée, comme ce sera le cas très souvent dans cette thèse, les modes  $TE_{12}$  et  $TE_{21}$  sont dégénérés.

L'équation (II.2.18) donne de bons résultats pour des résonateurs isolés, mais dans notre cas, où le couplage inter-résonateurs est parfois très important, elle montre ses limites (écarts supérieurs à 3% sur la position en fréquence des résonances), nous le verrons plus en détails dans le Chapitre IV. Cette équation nous sera néanmoins utile pour calibrer les dimensions de nos résonateurs afin qu'ils résonnent dans la bonne gamme de fréquence.

### 3 Modélisation par éléments finis

Nous abordons maintenant les outils numériques utilisés au cours de cette thèse, en expliquant la méthode des éléments finis, base du fonctionnement du logiciel utilisé (Ansoft HFSS) pour ensuite détailler la méthode de traitement des données, ou *post-processing* dans la littérature, permettant d'extraire les paramètres effectifs des données de simulations.

#### 3.1 Pourquoi faire une analyse numérique ?

Nous venons de voir, via le modèle de Cohn, comment prédire de manière correcte la position de nos résonances. Pour être encore plus précis, il existe d'autres méthodes analytiques, certaines tenant compte des résonances de Mie, comme les théories du milieu effectif, parmi lesquelles on peut citer celle de Maxwell Garnett [98] ou encore de Bruggeman [99]. A titre d'exemple, la théorie de Maxwell Garnett s'avère particulièrement précise dans ses prédictions pour des structures diélectriques dans un milieu hôte, comme le montrait Campione *et al.* récemment [41,100]. Ces méthodes analytiques n'ont pas été utilisées directement dans le cadre de cette thèse, leur description est donc faite en Annexe A uniquement.

Bien que précises, ces méthodes analytiques ne sont jamais suffisantes. Souvent, pour des structures complexes (autre que des sphères ou des cubes), elles montrent vite leurs limites. En réalité, pour l'instant, il n'y a pas de méthode analytique suffisamment précise pour prédire le comportement d'un métamatériau en toute circonstance. Il est donc nécessaire d'utiliser, quasi-systématiquement, une méthode numérique pour modéliser au mieux la réponse d'un métamatériau, ne serait-ce que pour contourner les limites des modèles analytiques.

Il existe de nombreuses méthodes d'analyses numériques, les plus courantes étant les méthodes basées sur des équations intégrales, abrégées IE (*Integral-Equation*) [101] et celles basées sur des équations différentielles. Ces dernières sont le plus souvent la FDTD (*Finite-Difference Time-Domain*) [102], la FIT (*Finite Integration Technique*) [103] et en l'occurrence la méthode des éléments finis, ou FEM (*Finite Elements Method*) [104], qui nous intéresse ici. Nous allons donc décrire dans cette partie le principe de cette méthode, son intérêt, ainsi que le fonctionnement du logiciel commercial utilisé au cours de cette thèse.

#### 3.2 Principe de la méthode des éléments finis

Réellement développée à partir des années 40 [105], la méthode des éléments finis est une méthode de résolution numérique d'équations aux dérivées partielles (EDP). Elle est devenue populaire car elle permet de résoudre simplement des problèmes complexes de mécanique des structures, et s'est révélée efficace pour d'autres domaines de la physique, dont l'électromagnétisme.

Dans la pratique, cette méthode numérique fait une approximation finie d'un milieu infini : elle discrétise la géométrie du problème en plusieurs sous-domaines formant ce

qu'on nomme le maillage. Évidemment, plus le maillage est fin, plus l'approximation est bonne, en revanche la demande en ressources informatiques sera plus importante, donc le temps de calcul allongé. Il y a donc toujours un compromis à trouver entre la précision souhaitée et le temps de calcul.

Il y a différents types de maillage. A deux dimensions, les éléments de base du maillage sont des triangles ou des rectangles. A trois dimensions, ce sont des tétraèdres ou des figures régulières type parallélépipède, pyramides tronquées, etc. (voir figure II.3.1). Le logiciel HFSS décrit dans la partie suivante utilise un maillage tétraédrique puisque cela permet de mailler plus facilement des géométries complexes (structures courbes, etc.). Cela nécessite en revanche plus de ressources informatiques, c'est pourquoi certains logiciels utilisent encore des maillages réguliers, même s'ils ne sont efficaces que sur des domaines simples.

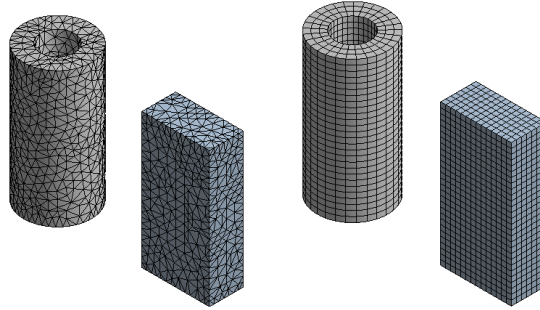


FIGURE II.3.1 – Différence entre un maillage tétraédrique (gauche) et un maillage régulier (droite). Le logiciel HFSS fonctionne avec des tétraèdres. (Source images : wikipedia)

Afin d'illustrer son fonctionnement, nous prendrons un exemple simple à une dimension et le résoudrons. Cet exemple est généralisable à trois dimensions, plus de détails à ce sujet dans les ouvrages de références de Akin et Mitchell [106, 107].

Prenons, sur un intervalle géométrique  $[a; b]$ , un système régit par l'équation différentielle suivante :

$$\mathbf{L}[u(x)] = f(x) \quad (\text{II.3.1})$$

où  $\mathbf{L}$  est un opérateur différentiel linéaire,  $x$  la variable,  $u$  une solution exacte du problème et  $f$  une fonction quelconque. On suppose les conditions aux limites  $u(a)$  et  $u(b)$  connues.

On cherche une combinaison linéaire de fonctions  $\phi_i$ , indépendantes, capables de donner une solution approchée  $\tilde{u}(x)$  de la fonction  $u(x)$ , de sorte que :

$$\tilde{u}(x) = \sum_{i=1}^{\tilde{n}} c_i \phi_i(x) \quad (\text{II.3.2})$$

où  $c_i$  sont des coefficients à déterminer par le logiciel. Les fonctions  $\phi_i$  sont appelées fonctions d'interpolations, et sont souvent des polynômes.

En substituant  $\tilde{u}(x)$  à  $u(x)$  dans l'équation (II.3.1), le résultat ne sera plus égal à  $f(x)$ , il existe ce que l'on appelle un résidu  $r$ , différent de zéro, et défini comme :



$$\mathbf{L}[\tilde{u}(x)] - f(x) = r[\tilde{u}(x)] \quad (\text{II.3.3})$$

Il y a une méthode permettant de minimiser ce résidu, elle porte le nom de méthode des résidus pondérés. Pour cela, on construit une intégrale  $R_j$  correspondant au produit de ce résidu par une fonction de pondération, notée  $w_j$ , de la manière suivante :

$$R_j = \int_a^b r[\tilde{u}(x)] w_j(x) dx \quad (\text{II.3.4})$$

Pour la fonction exacte  $u(x)$ , cette intégrale est nulle, quel que soit  $x$ . Pour la fonction approchée  $\tilde{u}(x)$ , cette intégrale s'annule seulement lorsque le résidu est minimum (pour un type de fonction de pondération donnée). Cette intégrale permet de définir la solution approchée par l'expression :

$$\sum_{i=1}^{\tilde{n}} \int_a^b (L[c_i \phi_i(x)] - f(x)) w_j(x) dx = 0 \quad (\text{II.3.5})$$

où les inconnus sont les coefficients  $c_i$ . On passe donc d'un système différentiel (équation (II.3.1) continue) à un système matriciel (discontinu). Les fonctions de pondérations  $w_j$  sont déterminées par le logiciel HFSS, il existe diverses méthodes pour faire ce choix, selon le problème considéré (méthode des moindres carrés, méthode des collocations, méthode des sous-régions, méthode de Galerkin, etc.).

Pour HFSS, résoudre l'équation (II.3.5) à trois dimensions va générer des milliers d'équations, car  $\tilde{n}$  est généralement très grand. Les solutions  $c_i$  vont pouvoir être trouvées grâce à l'utilisation d'outils mathématiques comme le théorème de Green ou le théorème de flux-divergence, qui vont simplifier le problème et permettre d'inverser la matrice [108].

### 3.3 Le logiciel HFSS

HFSS est l'abréviation de « High Frequency Structure Simulator ». Il s'agit d'un logiciel commercial d'éléments finis, produit et développé par la société Ansys. Dans cette thèse ont été utilisées les versions 14 et 15 de HFSS.

Son fonctionnement peut se résumer en quatre étapes : il faut d'abord modéliser en 3D notre structure, puis fixer les conditions aux limites (PEC, PMC, etc.) et les conditions d'excitation (*waveports*, *Floquet's ports*, etc.). Ensuite le logiciel va automatiquement mailler cette structure à l'aide de tétraèdres, en suivant des critères de raffinement que l'utilisateur peut contrôler. C'est une étape importante et l'aspect « automatique » du calcul ne doit pas faire perdre de vue à l'utilisateur que cette étape peut échouer, ou converger pour de mauvaises raisons. Les indicateurs d'erreurs, que nous verrons dans la partie 3.3.3 sont là pour y remédier.

Une fois le maillage terminé, le logiciel va calculer le comportement du champ  $\mathbf{E}$  sur chaque ligne du maillage en résolvant l'équation différentielle suivante [108] :

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E} \right] - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (\text{II.3.6})$$

où  $\epsilon_0$  et  $\mu_r$  sont respectivement la permittivité et la perméabilité relative du milieu et  $k_0$  le vecteur d'onde incident, relié à la fréquence de l'onde par la relation de dispersion (II.1.38). Cette équation différentielle joue le rôle de l'équation (II.3.1) dans notre exemple précédent. Le champ  $\mathbf{H}$  quant à lui est déduit du champ  $\mathbf{E}$  par la relation :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\epsilon\mu} \nabla \times \mathbf{E} \quad (\text{II.3.7})$$

A partir des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  et connaissant les relations constitutives, toutes les autres grandeurs (vecteur de Poynting, etc.) peuvent être déduites. En définissant des ports d'entrée et de sortie pour une onde incidente sur nos structures, nous pouvons récupérer les paramètres S (pour *Scattering parameters*), produits de bases de notre méthode d'extraction des paramètres effectifs décrite dans la partie suivante. La figure II.3.2 schématise ces différentes étapes.

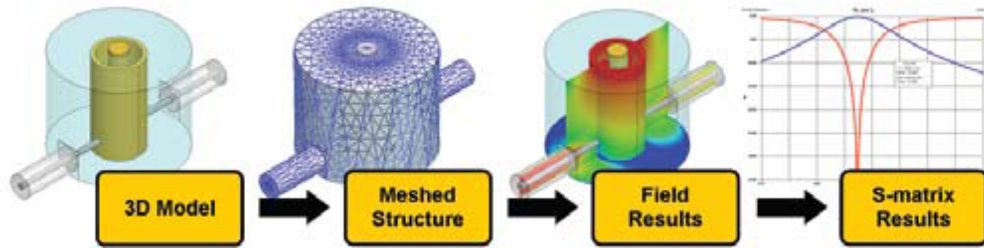


FIGURE II.3.2 – Résumé des étapes de fonctionnement du logiciel HFSS. On commence par modéliser notre structure en 3D, puis cette structure est discrétisée selon des critères que l'utilisateur peut contrôler. HFSS va alors résoudre les équations de propagation des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  sur chaque ligne de ce maillage, permettant ainsi d'obtenir les paramètres S de l'ensemble [108].

Nous allons rentrer plus en détail dans chacune des étapes clés de la simulation HFSS, en reprenant la structure de la figure II.3.3, qui décrit la marche à suivre générale. L'étape de *post-processing* correspond à notre partie 4 sur l'extraction des paramètres effectifs.

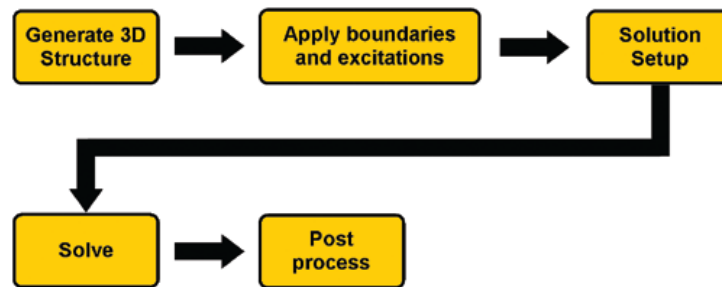


FIGURE II.3.3 – Etapes principales d'une simulation complète sous HFSS [108].

### 3.3.1 Générer une structure 3D

A la manière de beaucoup de logiciels de modélisations 3D (type Blender, SketchUp ou SolidWorks), HFSS permet de représenter n'importe quelle structure, même complexe, à partir de formes de bases (cubes, sphères, cônes, etc.), nommées « boîtes », et

de quelques outils de transformations géométriques (translation, rotation, duplication, intersection, etc.). Les propriétés physiques des « boîtes » (permittivité, pertes diélectriques, conductivité, etc.) sont également ajustables. Un exemple de modèle réalisé est donné sur la figure II.3.4, il représente *trois* cellules de bases (trois fois le pas) d'un réseau composé de deux tiges diélectriques 2D de sections carrées différentes. Le parallélépipède le plus grand s'appelle « boîte de simulation » puisqu'il sert à définir les conditions aux limites et les conditions d'excitation. Toutes nos structures sont forcément à l'intérieur de cette boîte.

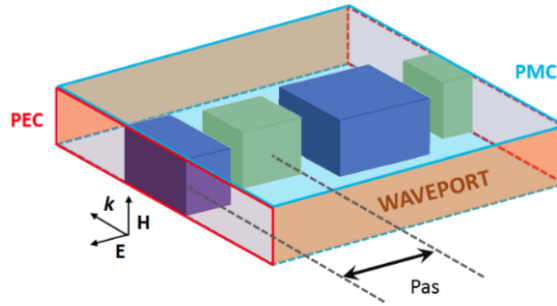


FIGURE II.3.4 – Exemple d'un modèle 3D HFSS pour un métamatériau 2D (*i.e.* infini dans la direction  $\mathbf{H}$ ) dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres diélectriques de section carrée. Les conditions aux limites PEC (rouge) et PMC (bleu clair) fonctionnent par symétrie miroir, c'est-à-dire que le modèle est reproduit à l'identique de l'autre côté de l'interface par symétrie plane, à la manière d'un miroir, c'est pourquoi les résonateurs latéraux sont coupés en leur milieu. Ces conditions permettent aussi de fixer la polarisation, ici TE car le champ  $\mathbf{E}$  est perpendiculaire à l'axe des tiges. Les *waveport* (en orange) délimitent les ports d'entrée et de sortie des OEM. Les paramètres  $S$  sont calculés entre ces deux ports uniquement.

Quel que soit la réponse « 2D » (tige infinie dans une direction de l'espace) ou « 1D » (plaque infinie dans deux directions de l'espace) ? laquelle nous nous intéressons, le modèle HFSS sera toujours un modèle 3D. Seules les conditions aux limites permettront de se placer en condition 2D ou condition 1D. Dans le cas de la figure II.3.4, la condition PMC permet de prolonger à l'infini la structure suivant  $\mathbf{H}$ , passant la cellule de base de 3D à 2D.

### 3.3.2 Appliquer les conditions aux limites et les conditions d'excitation

Il existe un grand nombre de conditions aux limites et de conditions d'excitations, la description de chacune n'est pas nécessaire, néanmoins, comme nos structures simulées au cours de cette thèse sont le plus souvent des systèmes infinis dans une ou deux directions de l'espace, il est important de parler des conditions les plus utilisées, à savoir les conditions aux limites « perfect E » et « perfect H », et les *waveport* pour les conditions d'excitations.

Les conditions « perfect E » et « perfect H » reproduisent respectivement les conditions d'un conducteur électrique parfait (PEC) et d'un conducteur magnétique parfait

(PMC). Elles ont été définies mathématiquement plus tôt, respectivement par les équations (II.2.2) et (II.2.1) : sur une interface en condition *perfect E* la composante tangentielle  $\mathbf{E}_{//}$  du champ  $\mathbf{E}$  et la composante normale  $\mathbf{H}_{\perp}$  du champ  $\mathbf{H}$  s'annulent. C'est exactement l'inverse pour une condition *perfect H*. Ces conditions nous permettent en premier lieu de fixer la polarisation incidente, transverse électrique (TE) ou transverse magnétique (TM). En second lieu, de par leur fonctionnement par symétrie « miroir », elles permettent de simuler la périodicité du réseau et de simplifier nos structures en réduisant la taille de la région simulée. On le voit sur la figure II.3.4, d'une part nos tiges sont censées être infinies dans la direction  $\mathbf{H}$ , la condition « perfect H » (PMC) permet donc de réduire la hauteur de la boîte de simulation, d'autre part, notre réseau est périodique dans la direction  $\mathbf{E}$ , la condition « perfect E » (PEC) permet donc de reproduire à l'infini notre cellule élémentaire, en prenant soins de couper les résonateurs en leur centre, à cause de la symétrie plane.

On obtient ainsi un modèle relativement simple dont les conditions aux limites et les conditions d'excitations permettent de modéliser un réseau infini dans la direction  $\mathbf{E}$  de tiges diélectriques 2D n'ayant qu'une couche d'épaisseur (la direction  $\mathbf{k}$ ).

### 3.3.3 Convergence du maillage

Pour s'assurer de la précision du modèle, HFSS met à disposition de l'utilisateur des indicateurs d'erreurs. Le but de ces indicateurs est de s'assurer, de manière relative, si le maillage est suffisamment fiable. Pour cela, HFSS va résoudre l'équation (II.3.6) à une fréquence donnée (nommée *solution frequency*) pour un maillage donné, et comparer le résultat avec ce même calcul pour un maillage plus fin. Si l'erreur relative  $\Delta S$  entre les deux calculs est supérieure à une certaine valeur fixée par l'utilisateur, alors l'affinement du maillage continue, jusqu'à converger (ou non) vers la valeur souhaitée. Un certain nombre d'option (pourcentage d'affinement du maillage à chaque passe, nombre de passes sous le critère de convergence, etc.) permettent à l'utilisateur d'avoir un contrôle relativement fin sur cette convergence. Précisons que plus le  $\Delta S$  est faible, plus le maillage est fin, ce qui allonge le temps de calcul.

Pour s'assurer que la convergence effectuée par le logiciel est correcte, on vérifie visuellement que l'erreur relative décroît de manière exponentielle après un nombre suffisamment grand d'itérations. Une mauvaise convergence a souvent une forme chaotique, comme on le voit à gauche sur la figure II.3.5. Il arrive aussi que la convergence soit décroissante exponentiellement au départ, mais se mette à « osciller » après un certain nombre d'itérations, d'où l'importance de fixer une limite assez haute pour le nombre d'itérations (typiquement, environ 20 itérations).

Une fois cette étape de convergence effectuée, HFSS va pouvoir définitivement calculer le champ sur l'ensemble du maillage grâce à l'équation (II.3.6). Si la convergence s'est terminée à l'itération  $n$ , le calcul va se faire avec le maillage de l'étape  $n - 1$ . Ce calcul se fera au moins à une fréquence (la *solution frequency*) ou sur toute une gamme de fréquence (*frequency sweep*) si l'utilisateur l'a demandé. A partir de là, on peut demander à HFSS de nous donner les paramètres de diffractions, ou paramètre  $S$ , de notre structure, sur la gamme de fréquence choisie.

Les étapes de traitement de ces données (le *post-processing* de la figure II.3.3) sont décrits plus amplement dans la partie suivante.

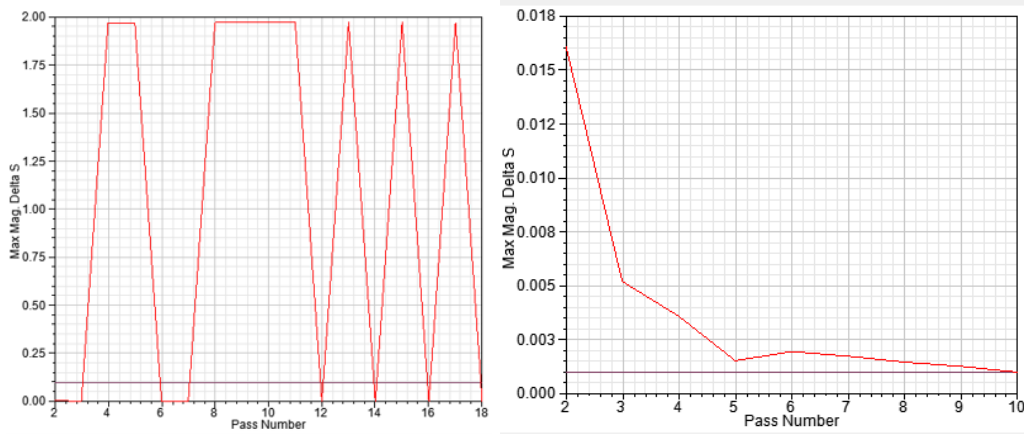


FIGURE II.3.5 – Erreur relative  $\Delta S$  en fonction du nombre d'itérations (*Pass number*) lors de l'affinement du maillage. On parle aussi de courbe de convergence du maillage. A gauche, un exemple de mauvaise convergence, due (souvent) à de mauvais critères de départ, comme une mauvaise *solution frequency*. A droite, un exemple de bonne convergence, en exponentiel décroissant. Le trait horizontal représente le  $\Delta S$  choisi par l'utilisateur, à gauche il vaut 0,01 et à droite 0,002.

## 4 Méthode d'extraction des paramètres effectifs

Il existe plusieurs méthodes d'extractions des paramètres effectifs. C'est une opération qui consiste à extraire de quantités calculées, ou mesurées, des grandeurs caractéristiques du système. Ici les quantités calculées sont les paramètres  $S$  issus des simulations HFSS, et les grandeurs caractéristiques de nos structures sont la permittivité, la perméabilité, l'indice et l'impédance effective.

La méthode la plus utilisée dans le domaine est la méthode NRW, du nom de ses auteurs Nicolson, Ross et Weir. [109, 110]. Elle est basée sur l'inversion des coefficients de Fresnel et permet de remonter, connaissant les paramètres  $S$ , à l'indice effectif et à l'impédance effective du milieu composite étudié. Nous allons voir de quelle manière exactement. Précisons que cette méthode n'est valide qu'en incidence normale.

### 4.1 Méthode NRW

Les coefficients de Fresnel, ou coefficients de réflexion  $r$  et de transmission  $t$ , sont définis comme :

$$r = \frac{E_r}{E_i} \quad (\text{II.4.1})$$

$$t = \frac{E_t}{E_i} \quad (\text{II.4.2})$$

où  $E_i$ ,  $E_r$  et  $E_t$  sont respectivement les amplitudes du champ électrique incident,

réfléchi et transmis. Ils permettent de quantifier le comportement d'une onde électromagnétique à l'interface entre deux milieux.

Par des relations de continuités aux interfaces (les composantes tangentielles des champs se conservent), on peut exprimer ces coefficients en fonction de l'indice des deux milieux. Cependant, il faut tenir compte de la polarisation incidente. On considère en général deux cas, lorsque le champ électrique est perpendiculaire au plan d'incidence (polarisation *transverse électrique* ou TE) et lorsque le champ magnétique est perpendiculaire au plan d'incidence (polarisation *transverse magnétique* ou TM).

Dans notre cas, comme nous l'avons vu précédemment, nous serons toujours en polarisation TE, et en incidence normale. Ainsi, pour une onde passant du milieu d'indice  $n_1$  au milieu d'indice  $n_2$ , on a :

$$r = \frac{n_1\mu_2 - n_2\mu_1}{n_2\mu_1 + n_1\mu_2} \quad (\text{II.4.3})$$

$$t = \frac{2n_1\mu_2}{n_1\mu_2 + n_2\mu_1} \quad (\text{II.4.4})$$

où  $\mu_1$  et  $\mu_2$  sont la perméabilité des milieux 1 et 2, respectivement. Pour des milieux non magnétiques, ces deux grandeurs sont égales à 1.

Ces deux formules sont utiles pour traiter le cas de réflexion-transmission, mais pour une seule interface seulement. Si l'on veut étudier une couche simple par exemple, il faut traiter le cas à deux interfaces, un peu plus complexe. Au-delà, il faut généraliser les équations (II.4.3) et (II.4.4) à  $n$ -interfaces. Chen *et al.* l'ont fait pour une couche de métamatériau, en les reliant à l'indice et à l'impédance effective de cette couche, c'est ce que nous allons voir maintenant [111].

#### 4.1.1 Coefficients de Fresnel et paramètres S

Comme on le voit sur la figure II.3.4 nous faisons nos calculs dans une boîte de simulation assimilables à un quadripôle (deux *waveport*, soit deux entrées/deux sorties), ainsi les paramètres S issus des simulations s'écrivent sous forme d'une matrice 2x2 :

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II.4.5})$$

où les paramètres diagonaux ( $S_{11}, S_{22}$ ) correspondent à la réflexion de la structure et les paramètres extra-diagonaux ( $S_{12}, S_{21}$ ) à sa transmission. Nous nous plaçons en plus dans le cas où cette structure est réciproque et symétrique, c'est-à-dire que  $S_{11} = S_{22}$  et  $S_{12} = S_{21}$ .

Les paramètres  $S_{11}$  et  $S_{12}$  sont donc les coefficients respectivement de réflexion  $r$  et de transmission  $t$  de notre structure, soit une généralisation à  $n$ -couches des coefficients de Fresnel définis en (II.4.3) et (II.4.4). Dans un article de 2004, Chen *et al.* exprime ces paramètres par :

$$S_{11} = \frac{R_{01}(1 - e^{i2N_{eff}k_0d})}{1 - R_{01}^2 e^{i2N_{eff}k_0d}} \quad (\text{II.4.6})$$

$$S_{12} = \frac{(1 - R_{01}^2)e^{iN_{eff}k_0d}}{1 - R_{01}^2 e^{i2N_{eff}k_0d}} \quad (\text{II.4.7})$$

avec

$$R_{01} = \frac{Z_{eff} - 1}{Z_{eff} + 1} \quad (\text{II.4.8})$$

où  $d$  est l'épaisseur de la couche de métamatériau,  $k_0$  le vecteur d'onde incident, et  $N_{eff}$  et  $Z_{eff}$  respectivement l'indice *effectif* et l'impédance *effective* du métamatériau considéré [111]. C'est en inversant ces coefficients de Fresnel que l'on va pouvoir remonter à la permittivité *effective* et la perméabilité *effective* souhaitées du métamatériau.

#### 4.1.2 Calcul de l'impédance et de l'indice

La première étape consiste à calculer l'indice *effectif*  $N_{eff}$  et l'impédance *effective*  $Z_{eff}$  par inversion des équations (II.4.6) et (II.4.7). Toujours d'après l'article de Chen, on a :

$$Z_{eff} = \pm \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{11})^2 - S_{21}^2}} \quad (\text{II.4.9})$$

$$e^{iN_{eff}k_0d} = \frac{S_{21}}{1 - S_{11}\frac{Z_{eff}-1}{Z_{eff}+1}} \quad (\text{II.4.10})$$

Pour lever l'ambiguïté du signe devant la racine de l'impédance, il suffit de se placer dans les conditions d'un milieu passif, soit  $\text{Re}(Z_{eff}) \geq 0$  et  $\text{Im}(Z_{eff}) \geq 0$  [111]. Ainsi l'extraction de l'impédance *effective* ne pose pas de problème.

L'extraction de l'indice *effectif* est plus problématique. Comme on le voit sur l'équation (II.4.10), il est nécessaire d'utiliser un logarithme complexe pour extraire l'indice, or c'est une fonction multivaluée, qui n'est pas pleinement continue sur  $\mathbb{C}$ . Il y a une succession de valeurs possibles lors de l'extraction de l'indice (on parle de « branches » de l'indice) et il faut développer une méthode pour vérifier si l'on se trouve sur la bonne branche de l'indice, et changer de branche si nécessaire. Une méthode de vérification intéressante a été proposée par Szabo *et al.* [112] en 2010, elle se base sur les relations de Kramers et Kronig, c'est ce que nous avons choisi de prendre comme méthode de calculs et nous allons en détailler ici le fonctionnement.

## 4.2 Kramers-Kronig appliqué au choix de la branche

Les relations de Kramers et Kronig relient les parties réelle et imaginaire de n'importe quelle grandeur complexe caractérisant un système passif. En langage mathématique, on parlera de fonctions qui sont analytiques sur le demi-plan supérieur de la variable complexe.

Ainsi, pour une fonction complexe de type  $f(\omega) = f_1(\omega) + if_2(\omega)$ , les fonctions réelles  $f_1$  et  $f_2$  sont reliées par :

$$f_1(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega f_2(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (\text{II.4.11})$$

$$f_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{f_1(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (\text{II.4.12})$$

Dans notre cas, nous appliquerons ces formules à l'indice de réfraction d'un milieu dispersif du type  $N(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ , les parties réelles et imaginaires doivent donc respecter les conditions suivantes :

$$n(\omega) - n_\infty = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\Omega \kappa(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (\text{II.4.13})$$

$$\kappa(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{n(\Omega) - n_\infty}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (\text{II.4.14})$$

où  $n_\infty$  désigne l'indice optique à haute fréquence et  $P$  la partie principale de l'intégrale, ce qui suppose que l'intégrale de  $N(\omega)$  sur le domaine de définition converge. On ne peut pas utiliser Kramers et Kronig sur des grandeurs qui divergent.

D'après l'équation (II.4.10), l'indice *effectif*  $N_{eff}$  de notre structure s'écrit comme :

$$N_{eff} = \frac{1}{k_0 d} (Im[ln(e^{iN_{eff}k_0d})] + 2m\pi - i.Re[ln(e^{iN_{eff}k_0d})]) \quad (\text{II.4.15})$$

où  $m$  est justement un entier correspondant à la branche de l'indice *effectif*. Toute la difficulté réside dans le bon choix de celle-ci. On voit que la partie imaginaire de l'indice ( $Re[ln(e^{iN_{eff}k_0d})]$ ) n'est pas affectée par le problème de branche, elle peut donc être calculée sans ambiguïté. Ainsi, à l'aide de la relation (II.4.11), on peut déterminer la partie réelle de l'indice « de Kramers-Kronig », noté  $n_{KK}$  (qui n'est pas l'indice *effectif* final) de la manière suivante :

$$n_{KK}(\omega) = n_\infty + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega \kappa_{eff}(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (\text{II.4.16})$$

où  $\kappa_{eff}$  correspond à la partie imaginaire de (II.4.15), soit  $Re[ln(e^{iN_{eff}k_0d})]$ , et  $n_\infty$  l'indice optique à haute fréquence du métamatériau.

Cette intégrale est définie sur toute la gamme de fréquence, allant de 0 à l'infini, les paramètres  $S$  à partir desquels l'indice *effectif* est extrait doivent donc en théorie être connus sur toute la gamme également. Comme en pratique cela n'est pas possible, les intégrales seront tronquées, ce qui nuit à la précision de la méthode. Pour une bonne précision, il faut donc considérer une gamme suffisamment large pour observer des limites haute et basse fréquence qui tendent vers une valeur finie. Sans cela, cette méthode ne fonctionnera pas correctement et deviendra inutilisable.

La valeur de l'entier  $m$  de l'équation (II.4.15) se déduit de la manière suivante :

$$m = \text{Round} \left[ (n_{KK} - Re(N_{eff})) \frac{k_0 d}{2\pi} \right] \quad (\text{II.4.17})$$

où la fonction  $\text{Round}()$  arrondit à l'entier le plus proche. La bonne branche sera donc la plus proche de la valeur prédite par les relations de Kramers-Kronig.

Par suite, ayant levé l'ambiguïté sur la valeur de  $N_{eff}$ , on retrouve les paramètres effectifs de la structure en inversant les deux relations suivantes :

$$N_{eff} = \sqrt{\epsilon_{eff} \cdot \mu_{eff}} \quad (\text{II.4.18})$$

$$Z_{eff} = \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\epsilon_{eff}}} \quad (\text{II.4.19})$$



On retrouve facilement la permittivité *effective* et la perméabilité *effective* désirée :

$$\mu_{eff} = N_{eff}.Z_{eff} \quad (\text{II.4.20})$$

$$\epsilon_{eff} = \frac{N_{eff}}{Z_{eff}} \quad (\text{II.4.21})$$

#### 4.2.1 Exemple dans la littérature : Szabo

Cette méthode d'extraction des paramètres *effectifs* a été programmée sous GNU Octave (logiciel libre comparable à MATLAB) et testée sur diverses publications, l'une d'elles est présentée ici pour l'exemple. Les résultats de Szabo *et al* nous ont été particulièrement utiles pour vérifier le code du choix de la branche, ce pour deux raisons. Déjà puisque son cas nécessitait plusieurs changements de branches successifs sur une courte gamme de fréquence, et ensuite parce que ces résultats bruts de simulations (paramètres S) étaient mis librement à disposition [112]. La figure II.4.1 montre l'indice *effectif* de ses structures, à gauche le cas publié par Szabo, à droite le même cas mais dont l'indice *effectif* a été extrait par mon code d'extraction suivant la méthode décrite ci-dessus : je calcule l'impédance *effective* et l'indice *effectif* par inversion des coefficients de Fresnel, puis je vérifie la branche de l'indice par les relations de Kramers-Kronig. On voit que les courbes sont sensiblement identiques.

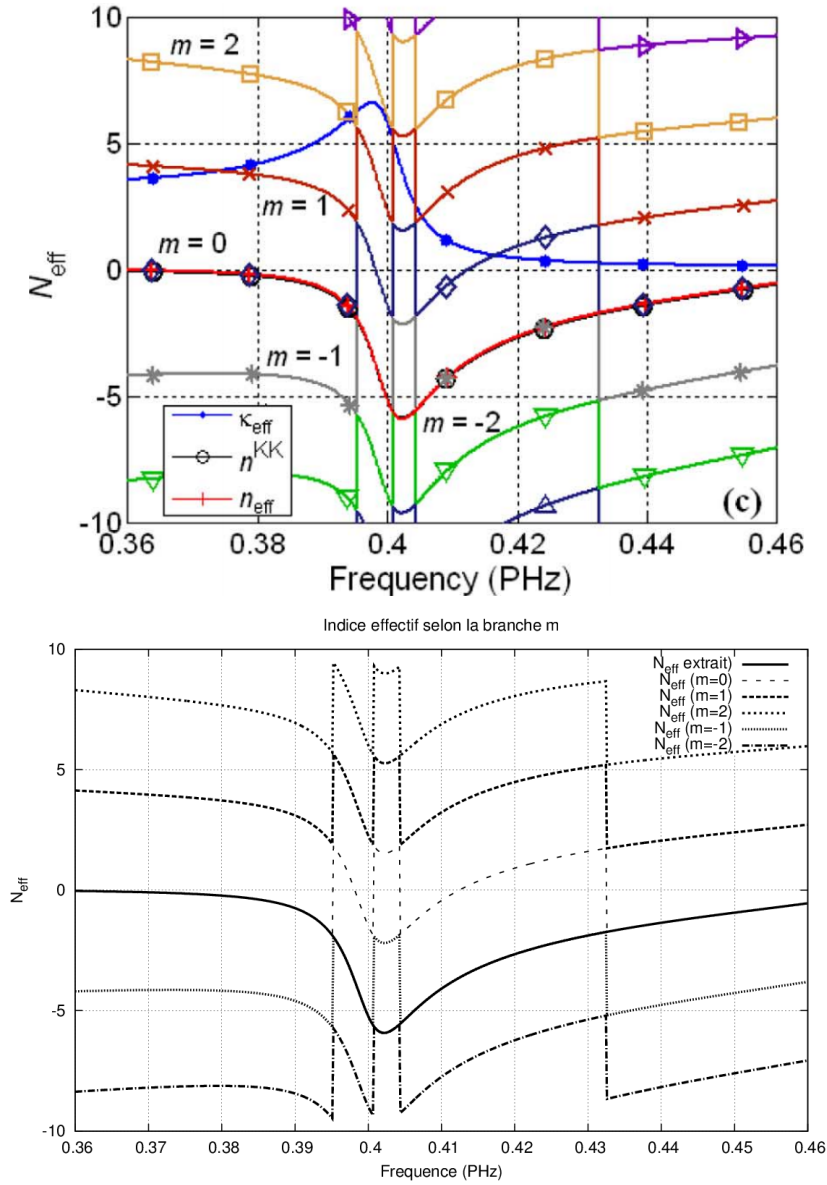


FIGURE II.4.1 – Indice effectif au niveau d’une résonance d’un métamatériau métallique (SRR + fils) de 200 nm d’épaisseur. En haut, les calculs publiés par Szabo, en bas, mes résultats, sans la partie imaginaire, par la méthode d’extraction décrite précédemment. Dans les deux cas, on voit les différentes branches possibles de l’indice (de  $m = -2$  à  $m = 2$ ), ainsi que la partie réelle de l’indice *effectif* final (en rouge chez Szabo, en gras chez moi). Les paramètres  $S$  sont rigoureusement identiques dans les deux cas, la méthode d’extraction est aussi la même, seul le code d’extraction est légèrement différent puisque Szabo utilise la méthode des trapèzes pour ses intégrales alors que j’utilise une méthode moins gourmande en temps de calcul. On observe des résultats identiques, confirmant la validité de la méthode.

### 4.3 Application à des résonateurs diélectriques simples

Nous avons testé cette méthode d'extraction des paramètres effectifs sur des métamatériaux relativement simples, ne nécessitant pas forcément de changement de branches. S'inspirant des travaux de Thomas Lepetit *et al.* vers 10 GHz [59,60], nous avons simulé sous HFSS un ADM composé de cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ,  $\tan \delta = 0,01$ ) de section carrée de  $90 \mu\text{m}$  de côté. Nous avons ensuite extrait les paramètres effectifs dont le résultat est visible sur la figure II.4.2.

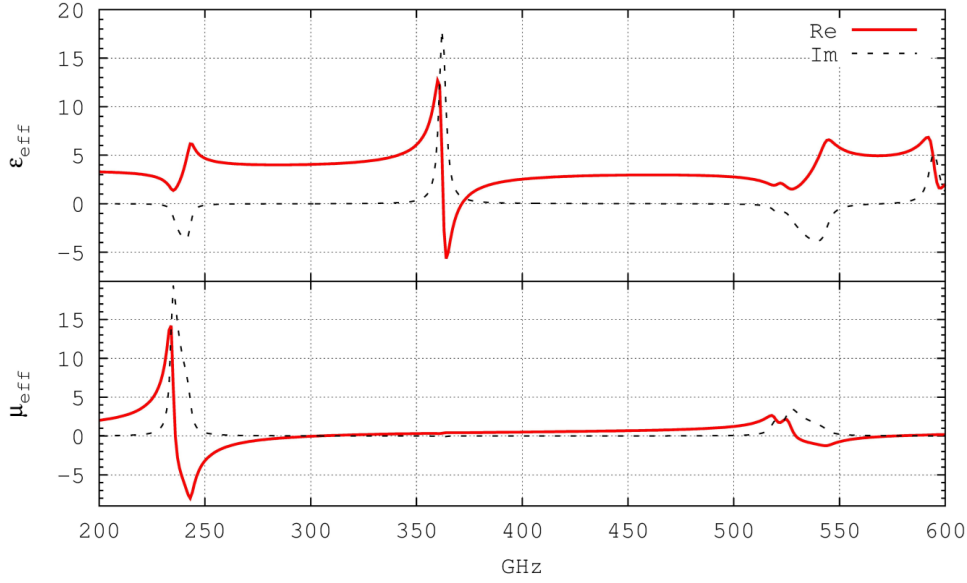


FIGURE II.4.2 – Permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$  d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ,  $\tan \delta = 0,01$ ) de section carrée de  $90 \mu\text{m}$  de côté. On distingue nettement les trois premiers modes de résonances donnés par la formule (II.2.18), soit  $\text{TE}_{11} = 236 \text{ GHz}$ ;  $\text{TE}_{12} = 373 \text{ GHz}$ ;  $\text{TE}_{13} = 527 \text{ GHz}$ .

Pour comprendre la nature des résonances sur la permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et la perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$ , il est important de s'intéresser à la distribution des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  au sein de chaque résonateur diélectrique.

L'article de Lepetit *et al.* montre la distribution des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  pour les trois premiers modes de résonance de Mie  $\text{TE}_{11}$ ,  $\text{TE}_{12}$  et  $\text{TE}_{13}$  dans le cas d'un ADM ayant la même cellule élémentaire mais dans la gamme micro-ondes [60]. Le mode  $\text{TE}_{11}$  est magnétique car la circulation du champ  $\mathbf{E}$  au sein du résonateur crée un moment dipolaire magnétique  $\mathbf{P}_H$  selon l'axe du cylindre. Le mode  $\text{TE}_{12}$  est électrique car, comme le décrit Lepetit *et al.*, la circulation du champ  $\mathbf{E}$  au sein du résonateur crée *deux* moments dipolaires magnétiques  $\mathbf{P}_H$  de directions opposées dont la résultante est nulle, tandis qu'un moment dipolaire électrique  $\mathbf{P}_E$  apparaît [60]. Les cartes de champ des figures II.4.3 et II.4.4 illustrent respectivement le comportement du champ  $\mathbf{H}$  et  $\mathbf{E}$  pour les modes  $\text{TE}_{11}$  et  $\text{TE}_{12}$  d'un ADM composé de cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée de  $90 \mu\text{m}$  de côté. D'après l'équation (II.2.18) les fréquences de résonances de ces modes sont :  $\text{TE}_{11} = 236 \text{ GHz}$  et  $\text{TE}_{12} = 373 \text{ GHz}$ . Les vecteurs de polarisation  $\mathbf{P}_H$  et  $\mathbf{P}_E$  associés illustrent la nature « électrique » et « magnétique » de ces deux modes.

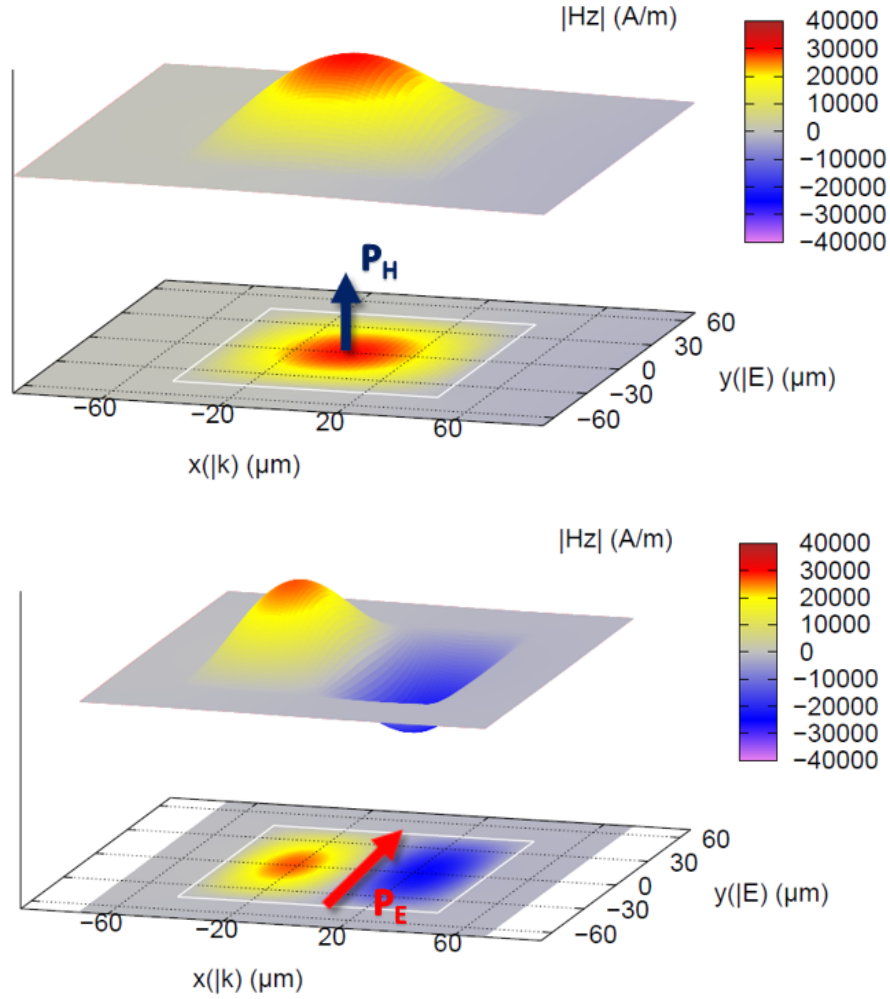


FIGURE II.4.3 – Cartographie du champ  $\mathbf{H}$  de la cellule élémentaire d'un ADM composé de cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ,  $\tan \delta = 0,01$ ), l'un dans le mode magnétique  $\text{TE}_{11}$  (haut) et l'autre dans le mode électrique  $\text{TE}_{12}$  (bas). Les cylindres sont de section carrée de  $90 \mu\text{m}$  de côté. Les champs ont été pris au maximum d'absorption, soit respectivement à 236 GHz pour le premier mode et 368 GHz pour le second mode. D'après l'équation (II.2.18) les fréquences de résonance des modes sont :  $\text{TE}_{11} = 236 \text{ GHz}$  et  $\text{TE}_{12} = 373 \text{ GHz}$ , soit un léger écart en fréquence pour le second mode. Pour  $\text{TE}_{11}$ , le vecteur de polarisation magnétique  $\mathbf{P}_H$  est non-nul et est représenté par un vecteur bleu foncé. Pour  $\text{TE}_{12}$ , le vecteur de polarisation électrique  $\mathbf{P}_E$  est non-nul et est représenté par un vecteur rouge [60].

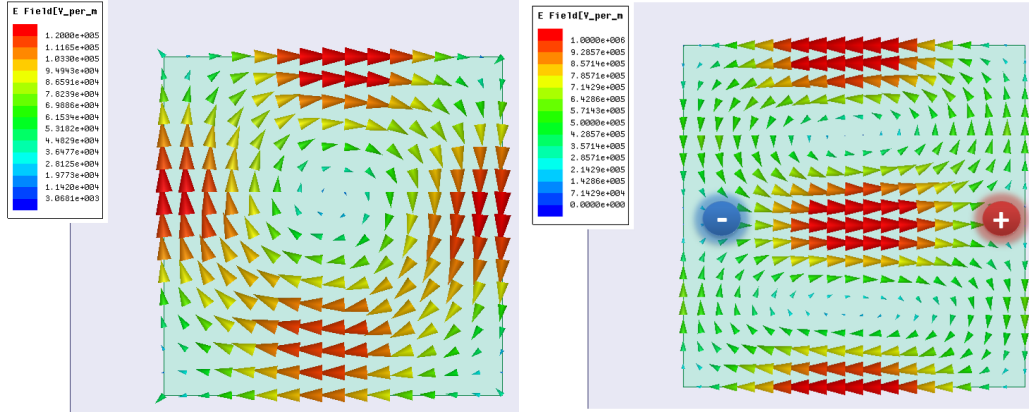


FIGURE II.4.4 – Circulation du champ  $\mathbf{E}$  via HFSS au sein de la cellule élémentaire d'un ADM composé de cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ,  $\tan \delta = 0,01$ ), l'un dans le modes  $\text{TE}_{11}$  (gauche) et l'autre dans le mode  $\text{TE}_{12}$  (droite). Les cylindres sont de section carrée et font  $90 \mu\text{m}$  de côté. Les flèches correspondent aux boucles de courant dans le résonateur, et la couleur caractérise l'intensité du champ. On remarque pour  $\text{TE}_{11}$  que la circulation du champ  $\mathbf{E}$  est constamment radiale, il n'y a pas de moment dipolaire électrique  $\mathbf{P}_E$ . Pour le mode  $\text{TE}_{12}$  la circulation du champ  $\mathbf{E}$  comporte deux boucles induisant deux composantes normales symbolisées par les signes « + » et « - ». On observe ainsi un moment dipolaire électrique  $\mathbf{P}_E$  [60].

Cette méthode d'extraction est certes efficace, élégante, et a déjà fait ses preuves [112–114], mais elle reste néanmoins limitée (comme les autres méthodes d'extractions d'ailleurs) par deux problèmes majeurs :

- . La précision des calculs HFSS sur les paramètres  $S$ , notamment quand  $S_{21}$  est trop proche de zéro.
- . La question de la bande de résonance, lorsqu'aucune valeur de  $m$  ne permet d'avoir des paramètres continus.

Ces deux problèmes furent déjà évoqués dans l'article de Chen en 2004 [111], nous y revenons ici plus en détail, avec des exemples concrets tirés de nos simulations, pour illustrer.

#### 4.4 Limites de la précision HFSS

En tant que méthode numérique, les simulations HFSS ne permettent pas d'obtenir une précision infime, comme peut le faire une méthode analytique par exemple. En effet, la précision apportée par la finesse du maillage n'est pas infinie. Elle est d'ailleurs, d'une certaine manière, inversement proportionnelle au temps de calcul de la simulation : plus la précision sera fine, plus la durée de simulation sera élevée. Il y a toujours un compromis à trouver entre la finesse désirée et un temps de calcul raisonnable.

Pour illustrer cette imprécision dans les calculs numériques, nous partons d'un cas simple : une plaque infinie ( $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 1$ , sans perte) de  $2.5 \text{ mm}$  d'épaisseur, dans de l'air. La figure II.4.5 montre l'impédance de cette monocouche, calculée de deux manière différente : à partir du logiciel HFSS d'un côté, et à partir des relations de Fresnel de

l'autre côté, en utilisant les relations pour deux interfaces décrites au début de la partie 4.1. On remarque que l'impédance « pointe » à intervalle régulier pour les résultats par HFSS, alors que celle-ci est sensée rester constante.

Cette différence n'est visible que sur les paramètres effectifs. Lorsque l'on superpose les paramètres S issus d'HFSS et ceux issus des relations de Fresnel, comme sur la figure II.4.6, on ne voit pas de différence aussi marquée. On remarque en revanche que ces « pics » ont lieu au niveau des *extrema* des paramètres S ( $S_{11}$  minimum,  $S_{21}$  maximum).

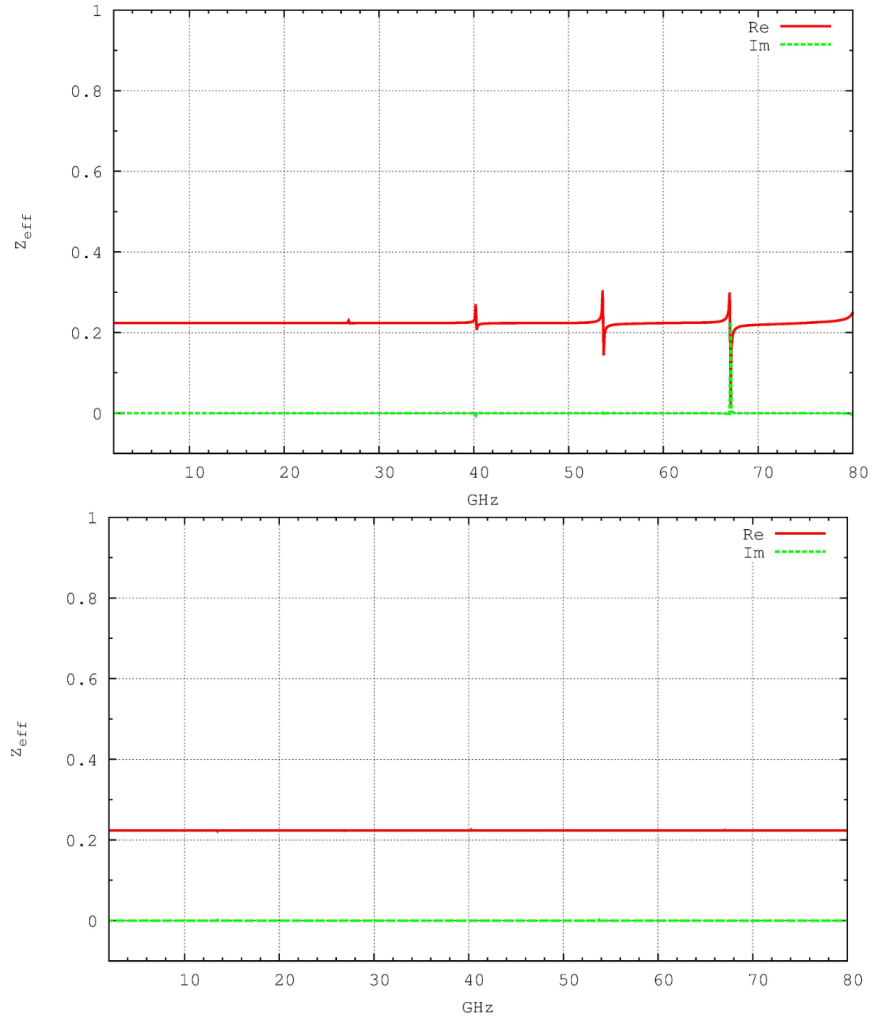


FIGURE II.4.5 – Impédance effective complexe extraite des simulations HFSS (en haut) et calculée par les relations de Fresnel (en bas) dans le cas d'une plaque d'épaisseur 2,5 mm avec  $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 1$ , sans perte. L'impédance « pointe » à intervalle régulier dans le cas des simulations HFSS. On remarque que ces écarts à la valeur théorique apparaissent au niveau des *extrema* de la Figure II.4.6.

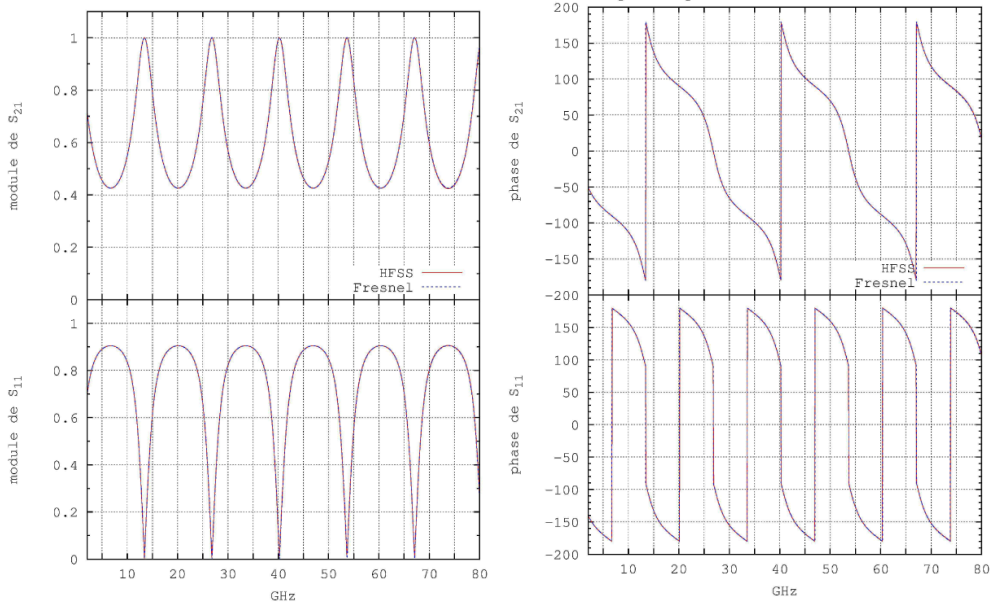


FIGURE II.4.6 – Superposition des paramètres S (en module et en phase) obtenus par simulation HFSS et par les relations de Fresnel pour une plaque d'épaisseur 2,5 mm avec  $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 1$ , sans perte. On ne voit pas de différence significative, pourtant les cas extrêmes ( $|S_{11}|$  minimum et  $|S_{21}|$  maximum) possèdent un écart relatif expliquant les pics sur la figure II.4.5.

Comme l'explique Chen *et al.*, ces artefacts sont liés à la sensibilité de la méthode d'extraction NRW lorsque les *extrema* sont atteints [111]. Rappelons que par cette méthode, l'impédance est reliée à  $S_{11}$  et  $S_{21}$  par l'équation (II.4.9) :

$$Z = \pm \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{11})^2 - S_{21}^2}} \quad (\text{II.4.22})$$

Ainsi, lorsque  $S_{21}^2$  est proche de l'unité et  $S_{11}$  proche de zéro, le dénominateur est lui aussi proche de zéro, rendant l'extraction de l'impédance *effective* difficile. A cause de cette relation, l'extraction est très sensible à la précision sur les paramètres S, puisqu'une légère imprécision sera amplifiée au carré. Dans le même article, Chen *et al.* décident d'associer une incertitude aux paramètres de réflexion et de transmission, offrant une marge d'erreur aux paramètres effectifs. On voit sur la figure II.4.7 que l'incertitude (les doubles flèches) augmente considérablement au voisinage des « pointes », confirmant ainsi leur lien avec la précision sur les paramètres S. Ce sont bien des artefacts de simulation.

A titre d'exemple, sur nos propres simulations de la figure II.4.6, le minimum de  $S_{11}$  vaut 0,0158 à 67,1 GHz par HFSS et 0,0089 par les formules de Fresnel, à la même fréquence, soit un écart relatif de près de 75 % entre les deux valeurs. Au niveau de l'impédance (figure II.4.5), celle-ci atteint la valeur de 0,30 à 67,1 GHz, soit un écart relatif de l'ordre de 34 % par rapport à sa valeur attendue ( $\sqrt{1/20}$ , soit environ 0,2236). A noter qu'un pas en fréquence plus petit (passage de 100 MHz à 10 MHz par exemple)

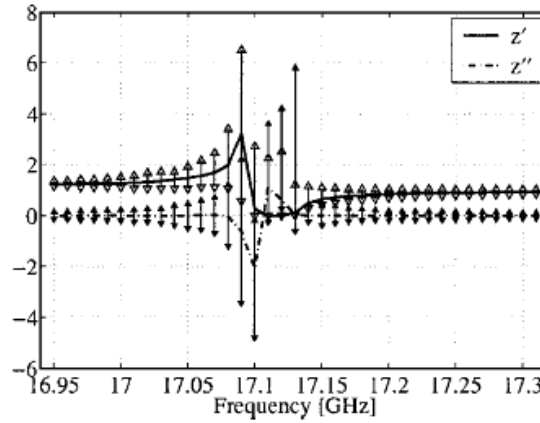


FIGURE II.4.7 – Impédance *effective* complexe d'un métamériau au niveau d'un artefact. Les barres d'erreurs (doubles flèches) s'élargissent suffisamment pour englober la discontinuité, montrant bien que ce phénomène est lié à la précision sur les paramètres  $S$  [111].

n'améliore pas la précision sur les paramètres  $S$  : les discontinuités demeurent.

En réalité, la solution est d'améliorer considérablement la précision sur le maillage. Pour des critères de convergence diminués (passage d'un seuil d'erreur relative  $\Delta S$  de 1 % à 0,1 % par exemple) et un maillage calculé à la fréquence de l'*extrema* le plus haut (67 GHz), la figure II.4.8 montre de bien meilleurs résultats sur l'extraction de l'impédance *effective*, qui devient quasiment linéaire. Afin de ne pas avoir un temps de calcul trop long, la section de la boîte de simulation a aussi été diminuée d'un facteur 5 ou 10. Notre plaque étant considérée comme infinie dans les deux directions de l'espace, cette opération est autorisée et ne pose pas de problème.

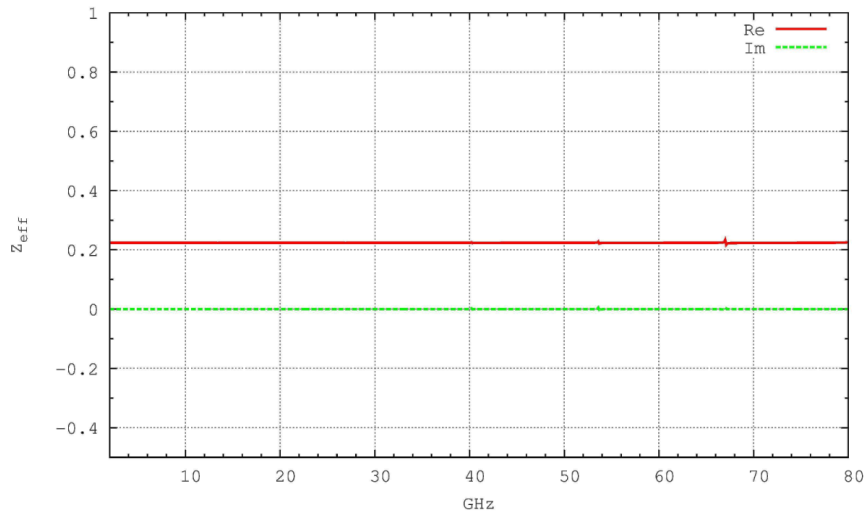


FIGURE II.4.8 – Impédance *effective* complexe extraite des simulations HFSS dans le cas d'une plaque infinie d'épaisseur 2,5 mm avec  $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 1$ , sans perte, avec un maillage plus fin. Par rapport à la figure II.4.5 , les artefacts disparaissent.



Pour mieux visualiser l'origine de ces imprécisions, il est intéressant de décomposer l'expression de l'impédance.

#### 4.4.1 Décomposition de l'impédance pour illustrer la précision

L'impédance de l'équation (II.4.22) peut en effet être décomposée d'un côté par son numérateur, de l'autre par son dénominateur. Cette décomposition nous permet de mieux voir l'erreur sur les paramètres  $S$  – puisque ceux-ci sont élevés au carré – et particulièrement aux fréquences correspondant à un *extremum*, c'est-à-dire lorsque l'un des termes de la fraction est minimum ou maximum. La figure II.4.9 nous montre trois cas. Le premier est calculé à partir des relations de Fresnel et correspond à un cas « idéal ». Le deuxième est simulé par HFSS avec une erreur relative  $\Delta S$  de 0,005 sur les paramètres  $S$ . Le troisième est simulé par HFSS avec une erreur relative  $\Delta S$  de  $5 \cdot 10^{-5}$ . Sur le premier cas, la fréquence de 78 GHz correspond à un *extremum*, cette fréquence se retrouve facilement connaissant la dimension de la structure et la fréquence incidente. On voit que le minimum du numérateur et celui du dénominateur coïncident parfaitement à la fréquence attendue. Dans le deuxième cas, le minimum du numérateur et celui du dénominateur ne coïncident plus, et sont légèrement décalés vers les basses fréquences, donc inférieurs au 78 GHz théorique. Dans le troisième cas, les minima du numérateur et du dénominateur coïncident de nouveau, le passage de  $\Delta S = 0,005$  à  $\Delta S = 5 \cdot 10^{-5}$  a considérablement amélioré la précision sur les paramètres  $S$  lors de la simulation, bien que la position en fréquence ne soit pas celle attendue.

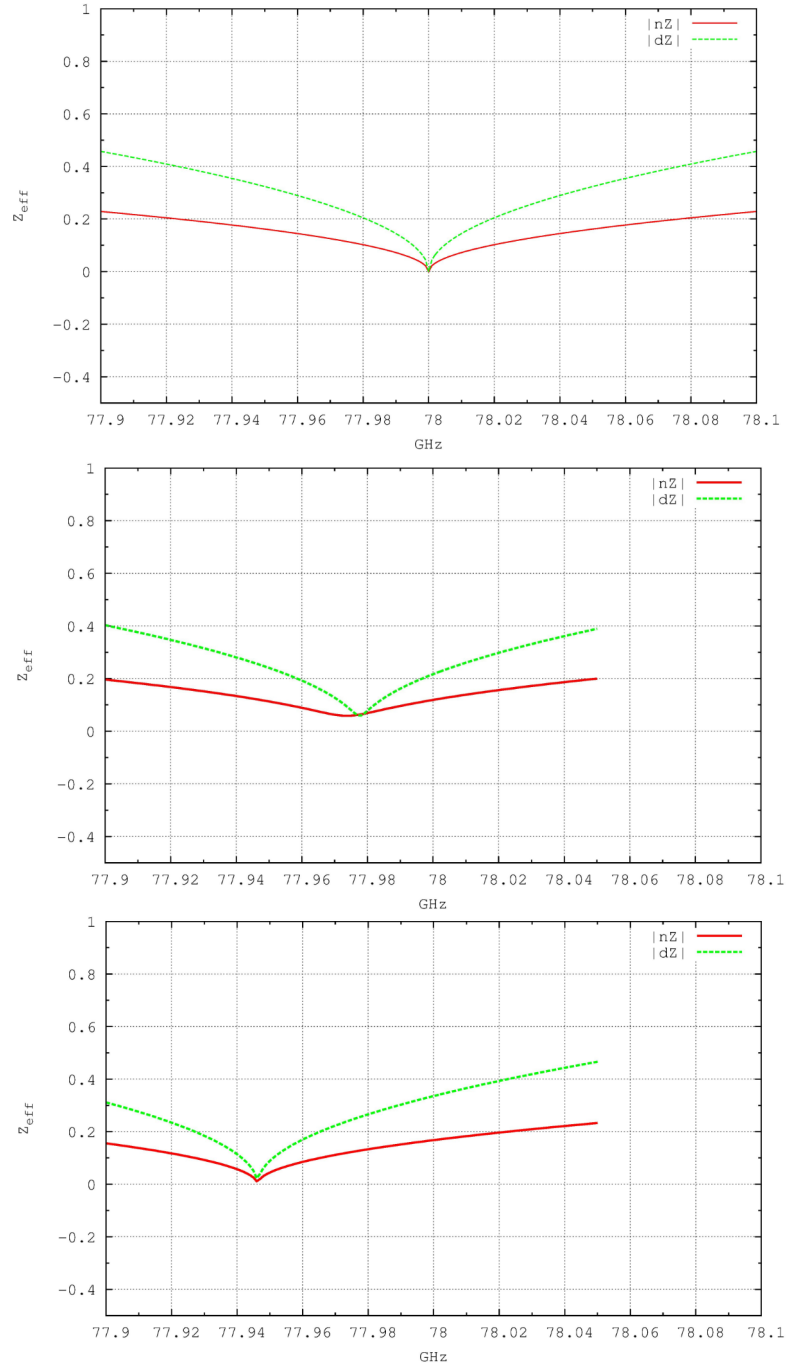


FIGURE II.4.9 – Impédance effective complexe décomposée en numérateur ( $nZ$ ) et dénominateur ( $dZ$ ) dans trois cas différents pour une plaque infinie d'épaisseur 2,5 mm avec  $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 5$ , sans perte. Le premier cas (haut) est calculé à partir des relations de Fresnel, le deuxième est simulé par HFSS avec une erreur relative  $\Delta S = 0,005$ , le troisième est simulé par HFSS avec une erreur relative  $\Delta S = 5.10^{-5}$ . On constate que les minimum du numérateur et du dénominateur ne coïncident pas si la valeur de  $\Delta S$  n'est pas suffisamment petite.

Le seul moyen d'éviter cet « effet de pointe » lors de l'extraction des paramètres effectifs est donc de diminuer considérablement l'erreur relative ( $\Delta S$ ) lors des simulations HFSS. Dans un cas simple comme celui d'une plaque infinie d'une seule épaisseur, c'est relativement facile à faire, puisqu'il suffit de diminuer la taille de la boîte de simulation. Mais dans des cas plus complexes ce n'est pas toujours possible, car un faible  $\Delta S$  n'est parfois pas atteignable du tout. La simulation peut ne jamais converger, à moins d'attendre un temps considérablement long.

La figure II.4.10 ci-après met en parallèle les paramètres effectifs calculés avec une erreur relative très faible ( $\Delta S = 5.10^{-5}$ ) et les paramètres effectifs idéaux, calculés à partir des relations de Fresnel. Les artefacts que l'on pouvait voir sur la figure II.4.5 ont quasiment disparus, les paramètres effectifs sont identiques.

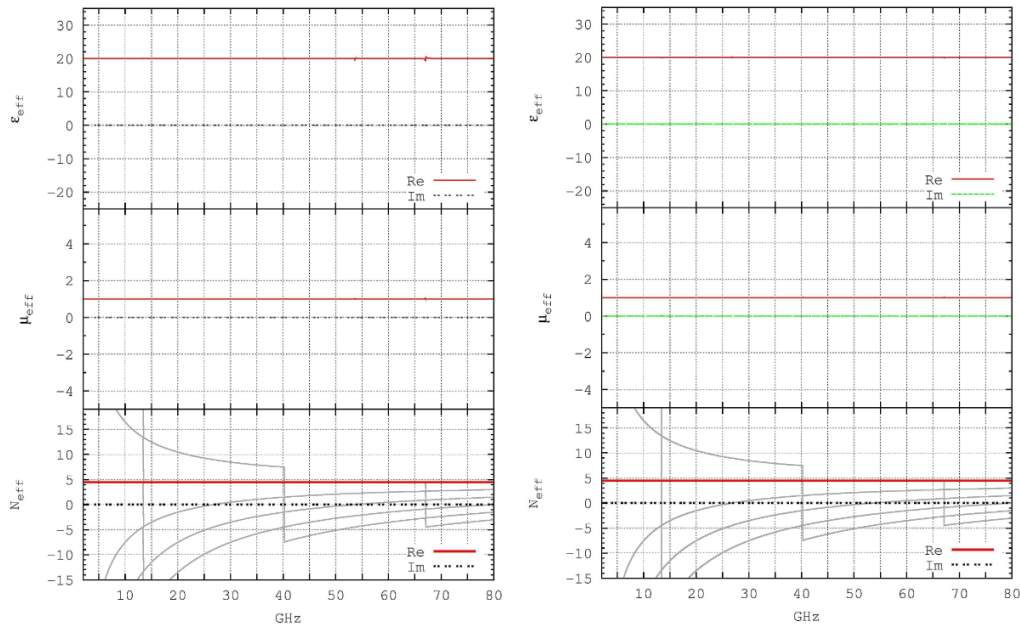


FIGURE II.4.10 – Permittivité, perméabilité et Indice *effectifs* complexes dans le cas d'une plaque infinie d'épaisseur 2,5 mm avec  $\epsilon_r = 20$  et  $\mu_r = 1$ , sans perte. A gauche, les paramètres sont extraits des simulations HFSS avec une erreur relative  $\Delta S = 5.10^{-5}$ , à droite, les paramètres sont calculés par les relations de Fresnel. On constate une très bonne similitude entre les deux.

## 4.5 Problématique de la bande de résonance

En ce qui concerne l'extraction des paramètres effectifs, la méthode NRW reste une des méthodes les plus utilisées dans le domaine [111, 115]. Cependant, il arrive que les paramètres effectifs ne soient plus valides, pour des raisons d'homogénéité par exemple. Cette méthode se retrouve donc limitée dans son extraction, et donne parfois des paramètres effectifs non-physiques. Pour cette raison, nous allons voir ici que cette limite est encore discutée parmi les chercheurs du domaine, la bonne démarche à adopter n'a pas encore été tranchée.

Premièrement, les matériaux que nous utilisons sont dit passifs, c'est-à-dire qu'ils ne produisent pas d'énergie. Mathématiquement, cela signifie que la partie imaginaire des paramètres effectifs est nécessairement positive, pour la permittivité  $\epsilon_{eff}$  comme pour la perméabilité  $\mu_{eff}$ . De plus, sachant que ces deux grandeurs sont reliées à l'indice effectif  $N_{eff}$  et l'impédance effective  $Z_{eff}$  par les relations suivantes :

$$\mu_{eff} = N_{eff} \cdot Z_{eff} \quad (\text{II.4.23})$$

$$\epsilon_{eff} = \frac{N_{eff}}{Z_{eff}} \quad (\text{II.4.24})$$

On peut en déduire une condition de validité de nos paramètres effectifs<sup>4</sup>, en se fixant comme critère :

$$\begin{cases} \mu''_{eff} \geq 0 \\ \epsilon''_{eff} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{II.4.25})$$

Ainsi, on peut en déduire que :

$$\begin{cases} N'_{eff} Z''_{eff} + N''_{eff} Z'_{eff} \geq 0 \\ \frac{-N'_{eff} Z''_{eff} + N''_{eff} Z'_{eff}}{Z_{eff}^2} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{II.4.26})$$

Soit :

$$\begin{cases} N''_{eff} Z'_{eff} \geq -N'_{eff} Z''_{eff} \\ N''_{eff} Z'_{eff} \geq N'_{eff} Z''_{eff} \end{cases} \quad (\text{II.4.27})$$

La condition de validité de ces paramètres effectifs pour un milieu passif d'indice  $N_{eff}$  et d'impédance  $Z_{eff}$  s'écrit donc :

$$N''_{eff} Z'_{eff} \geq |N'_{eff} Z''_{eff}| \quad (\text{II.4.28})$$

C'est à partir de ce critère que Chen *et al.* vérifient, en cas de multi-valuation de la partie réelle de l'indice *effectif*, si la branche choisie est la bonne [111]. Néanmoins, il arrive qu'aucune branche ne permet d'extraire un indice *effectif* continu, et la condition (II.4.28) n'est alors plus respectée sur une certaine gamme de fréquence. Dans ce cas, le milieu n'est plus considéré comme passif, les paramètres effectifs associés ne sont pas physiques, on appelle cette gamme de fréquence la *bande de résonance*.

Dans le cadre de ma thèse, cette bande de résonance apparaît souvent lorsque les effets du couplage deviennent trop importants, entraînant une absorption si forte que la continuité des paramètres effectifs n'existe plus. On le voit par exemple sur la figure II.4.11, où les discontinuités apparaissent lorsque le pas entre deux résonateurs diélectriques devient trop faible.

---

4. Pour alléger les notations, on pose ici que  $\text{Re}(\mu_{eff}) = \mu'_{eff}$ ,  $\text{Im}(\mu_{eff}) = \mu''_{eff}$ ,  $\text{Re}(\epsilon_{eff}) = \epsilon'_{eff}$  et  $\text{Im}(\epsilon_{eff}) = \epsilon''_{eff}$ .

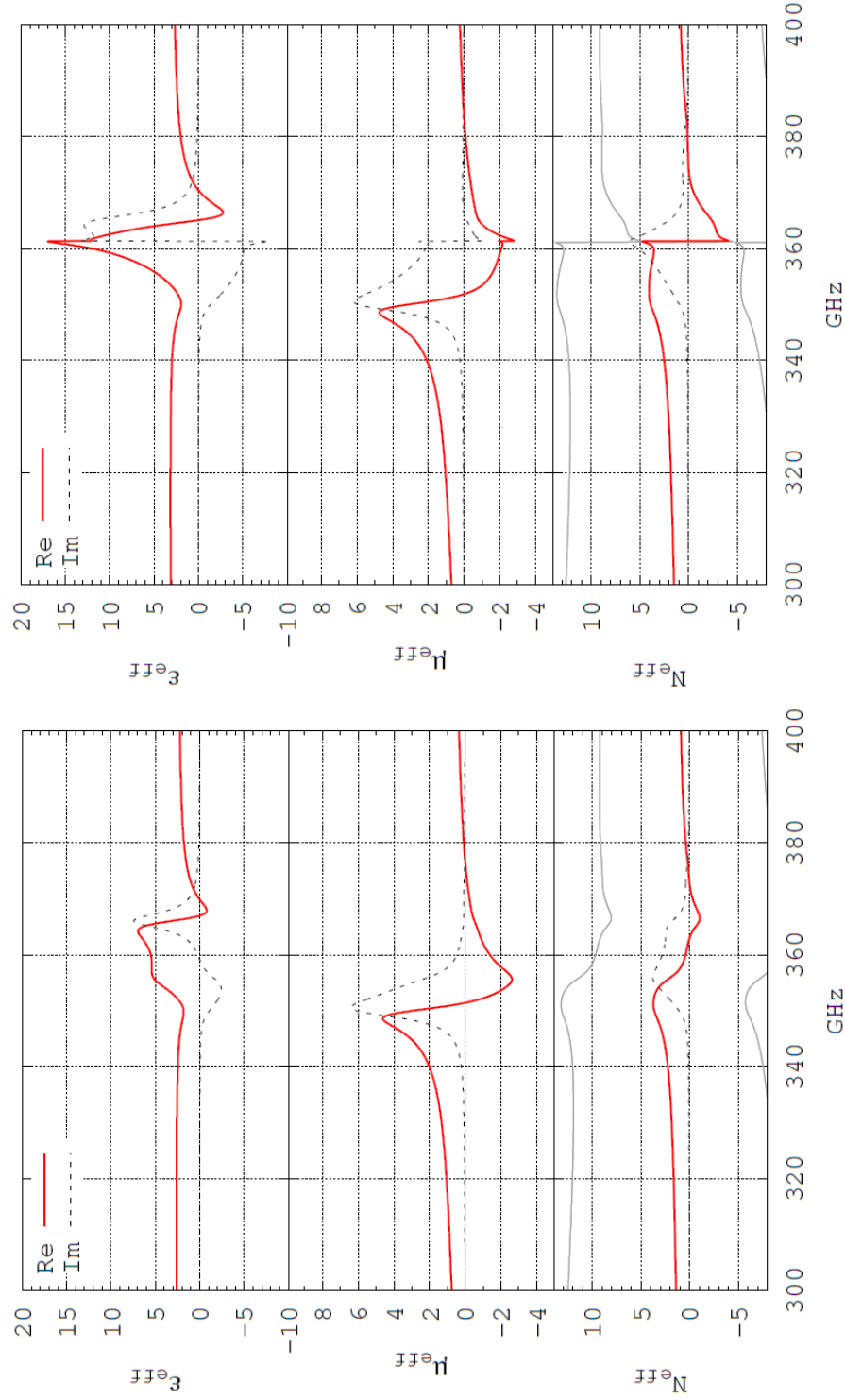


FIGURE II.4.11 – Paramètres effectifs d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ;  $\tan \delta = 0,01$ ) de 60 et 90  $\mu\text{m}$  de côté, pour un pas de 130  $\mu\text{m}$  (à gauche) et de 120  $\mu\text{m}$  (à droite). On voit que les paramètres ne sont plus continus dans le second cas, ceci est dû à un couplage trop important entre les tiges sur une courte gamme de fréquence. On appelle cette zone la bande de résonance, elle empêche toute possibilité de trouver une branche de l'indice respectant le critère (II.4.28). Les paramètres sont alors discontinus.

Peut-on tracer les paramètres effectifs dans la bande de résonance malgré tout ? La réponse à cette question n'est pas encore tranchée parmi les chercheurs du domaine. Certains décident de tracer les paramètres, quitte à ce qu'ils ne soient pas physiques, on observe alors des discontinuités dans les paramètres effectifs, ou des parties imaginaires négatives [14, 116], un exemple est visible en haut de la figure II.4.12.

D'autres au contraire préfèrent interrompre les résultats dans la bande de résonance [117–119], comme on le voit en bas de la figure II.4.12, considérant que cette région est liée à la présence de modes complexes, ne pouvant exister dans les milieux continus [119].

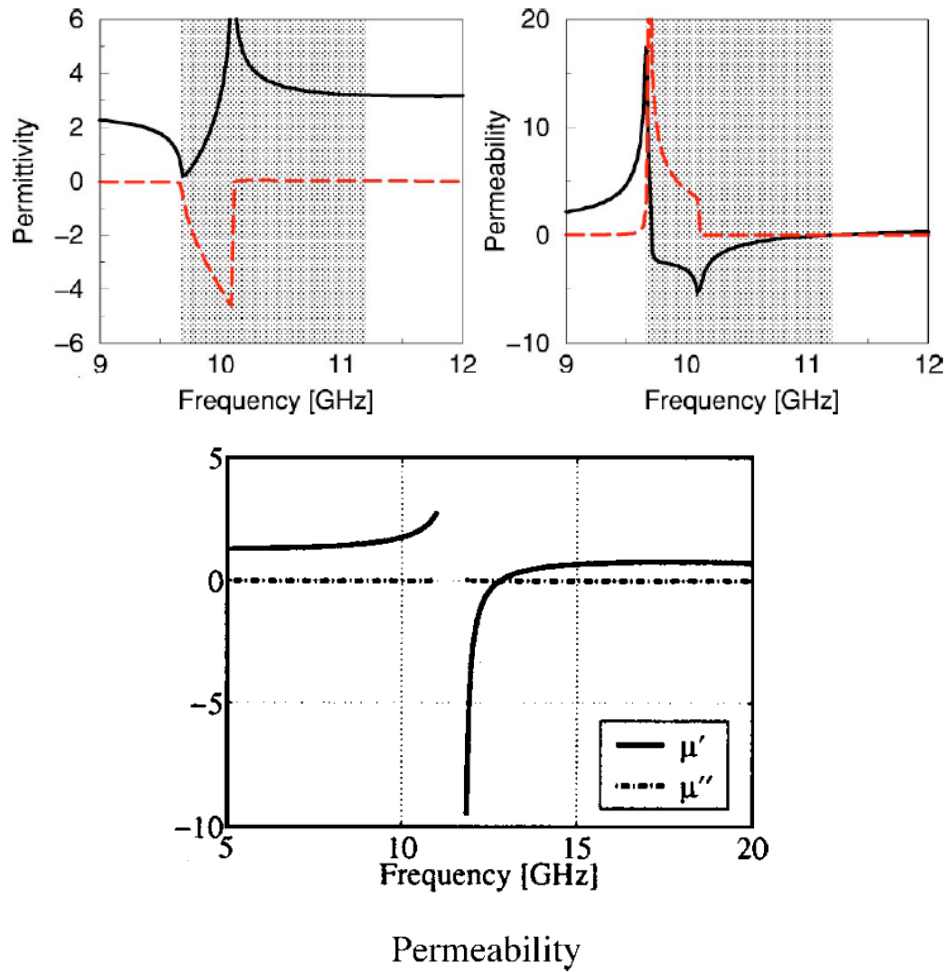


FIGURE II.4.12 – En haut, la permittivité *effective* et la perméabilité *effective* d'un métamatériau dans la bande de résonance. On voit une partie imaginaire négative sur la permittivité *effective* et des discontinuités (saut vers 10 GHz) dans la perméabilité *effective* [116]. En bas, la perméabilité *effective* coupée d'un métamatériau dans la bande de résonance délimitée par les pointillés verticaux [111].

Dans la suite de cette thèse, si ce cas de figure se présente, nous opterons pour la première solution, en précisant à chaque fois les limites de cette bande de résonance.

## 5 Conclusion

L'étude de résonateurs diélectriques dans la gamme térahertz fait donc intervenir des domaines de la physique assez variés. Après avoir décrit les bases en électromagnétisme nécessaires à la compréhension de cette thèse, ainsi que les principales caractéristiques physiques des métamatériaux diélectriques et les modèles analytiques existants pour comprendre leurs fonctionnements, nous avons abordé la première difficulté de cette thèse, à savoir, l'extraction des bons paramètres effectifs de nos structures.

Pour comprendre le principe d'extraction des paramètres effectifs et ses limites, il a été utile de décrire la méthode de modélisation par éléments finis, puisque une limite de ce code d'extraction est directement liée à la précision de la modélisation.

Le chapitre suivant va permettre d'aborder une autre difficulté à laquelle nous avons dû faire face : les diélectriques couramment utilisés dans les métamatériaux ont des comportements très différents selon la gamme de fréquence, en particulier dans la gamme térahertz. Il est donc important de bien connaître nos matériaux dans cette gamme de fréquence et c'est ce que nous allons voir maintenant.







## Chapitre III

# Choix du matériau au TéraHertz

## Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Conditions d'apparition des résonances</b>	<b>78</b>
1.1	Sur la permittivité du matériau . . . . .	78
1.2	Sur les pertes du matériau . . . . .	79
<b>2</b>	<b>Comportement des diélectriques au térahertz</b>	<b>81</b>
2.1	Différentes contributions selon la fréquence . . . . .	81
2.2	Modèles de permittivité au térahertz . . . . .	83
2.2.1	Modèle Pseudo-harmonique (PH) . . . . .	84
2.2.2	Modèle semi-quantique (SQ) . . . . .	85
2.2.3	Comparaison des deux modèles précédents . . . . .	85
<b>3</b>	<b>Matériaux étudiés dans la gamme TéraHertz</b>	<b>88</b>
3.1	Dioxyde du Titane ( $\text{TiO}_2$ ) . . . . .	88
3.2	Titanate de Strontium ( $\text{SrTiO}_3$ ) . . . . .	90
3.2.1	Caractérisation d'échantillons de $\text{SrTiO}_3$ . . . . .	94
3.3	Titanate de Baryum ( $\text{BaTiO}_3$ ) et dérivés . . . . .	98
3.4	Tantalate de Lithium ( $\text{LiTaO}_3$ ) . . . . .	100
3.5	Titanate de Magnésium ( $\text{MgTiO}_3$ ) . . . . .	101
3.6	Récapitulatif . . . . .	103

---

Nous venons de voir comment se comportent les métamatériaux de manière générale, et en quoi les diélectriques avec une permittivité suffisante peuvent servir dans la conception d'un métamatériau à indice négatif. Nous allons voir maintenant quelles sont précisément les conditions de résonances d'un diélectrique, afin de fixer les premiers critères de choix pour nos matériaux.

Un autre critère est lié à la gamme de fréquence dans laquelle nous travaillons. En effet, au térahertz, des vibrations propres au réseau cristallin, les phonons optiques, vont avoir un effet sur la polarisation globale du diélectrique, ce qui va « perturber » sa permittivité. Pour nos applications, c'est quelque chose que nous cherchons à éviter, surtout en raison des pertes associées, il nous faudra donc être relativement éloigné en fréquence de ces phonons optiques.

Après avoir abordé les conditions nécessaires à l'apparition d'un indice négatif au térahertz, nous passerons en revue les céramiques qui ont retenues notre attention, pour finalement conclure sur les matériaux choisis.

## 1 Conditions d'apparition des résonances

### 1.1 Sur la permittivité du matériau

Le premier critère à prendre en compte est le contraste d'indice entre les inclusions diélectriques et le milieu hôte. En effet, si ce contraste n'est pas suffisamment important, le champ électromagnétique ne sera pas suffisamment confiné à l'intérieur, aucune onde stationnaire ne pourra s'y maintenir et les inclusions ne vont donc pas résonner. De plus, nos milieux effectifs ne sont considérés comme homogènes que pour des dimensions au moins un ordre de grandeur en-dessous de l'onde incidente, soit pour des inclusions plus petites que  $\lambda / 10$  [120]. Ceci impose une condition sur la valeur de  $\epsilon_r$  qu'il nous faudra déterminer.

Dans le cas général, la résonance de cavité fondamentale d'une particule sphérique a lieu lorsque la longueur d'onde à l'intérieur de celle-ci est de l'ordre de grandeur de son diamètre. Autrement dit, dans notre cas, pour des tiges 2D de section carrée de côté  $d$  incluent dans un milieu hôte d'indice 1, la résonance fondamentale a lieu lorsque :

$$\lambda_i \approx d \quad (\text{III.1.1})$$

où  $\lambda_i$  est la longueur d'onde à l'intérieur des tiges. Celle-ci est reliée à la longueur d'onde  $\lambda_0$  de l'onde incidente par :

$$\lambda_i = \frac{\lambda_0}{\text{Re}(n_i)} \quad (\text{III.1.2})$$

avec  $n_i$  l'indice de réfraction des inclusions diélectriques ( $n_i^2 = \epsilon_{r_i} \mu_{r_i}$ ).

La condition de validité de notre milieu effectif suppose que la longueur d'onde incidente soit environ dix fois plus grande que les inclusions [120], on a :

$$\frac{\lambda_0}{10} > d \quad (\text{III.1.3})$$

Alors, d'après (III.1.1) et (III.1.2), la permittivité de notre diélectrique doit vérifier :

$$\text{Re}(n_i) > 10 \quad (\text{III.1.4})$$

Pour un diélectrique non magnétique ( $\mu_{r_i} = 1$ ) et avec des pertes relativement faibles, on peut faire l'approximation suivante :

$$\text{Re}(n_i) \approx \text{Re}(\sqrt{\epsilon_{r_i}}) \quad (\text{III.1.5})$$

La condition (III.1.4) devient alors :

$$\text{Re}(\epsilon_{r_i}) > 100 \quad (\text{III.1.6})$$

Voilà donc la première condition à respecter pour avoir un milieu effectif valide : à la résonance de Mie ( $\lambda_i \approx d$ ), pour rester dans un régime quasi-statique (inclusions très petites devant la longueur d'onde incidente) il faut que la permittivité relative des inclusions soit de l'ordre de 100. Il faut également tenir compte des pertes dans le matériau, donc fixer une condition sur la partie imaginaire de la permittivité.

## 1.2 Sur les pertes du matériau

Ce second critère est loin d'être négligeable. En effet, des pertes trop élevées font que les résonances n'ont pas l'amplitude nécessaire pour avoir une partie réelle négative, ce qui empêche toute possibilité d'avoir un matériau « doublement négatif » comme défini précédemment, et donc d'avoir un indice négatif.

La tangente de perte des matériaux étudiés, notée  $\tan \delta$ , est définie comme le rapport de la partie imaginaire sur la partie réelle de la permittivité relative  $\epsilon_r$  du matériau :

$$\tan \delta = \frac{\epsilon_r''}{\epsilon_r'} \quad (\text{III.1.7})$$

Par expérience, nos partenaires du projet ne peuvent pas travailler avec une tangente de perte trop grande (car trop d'absorption), ce qui empêche la bonne récupération des données. En plus d'être un frein expérimental, elles sont aussi un problème pour les résonances de Mie elles-mêmes, dont l'amplitude est fortement réduite si les pertes sont trop élevées. La seconde résonance de Mie étant dans un mode supérieur, son amplitude est plus faible, elle est donc plus sensible aux pertes élevées que la première résonance de Mie, c'est pourquoi la figure III.1.1 ne s'intéresse qu'à la seconde résonance de Mie. Nos simulations permettent de déterminer une valeur limite de la tangente de perte. Dans les deux cas de la figure III.1.1 le résonateur est une tige diélectrique 2D de section carrée en polarisation TE et le rapport pas/côté est égal à 1,5 dans les deux cas pour

limiter les effets du couplage sur les résonances. Le premier a une permittivité relative  $\epsilon_r$  de 100, un côté de  $90 \mu\text{m}$  et un pas de  $130 \mu\text{m}$  ; le second une permittivité relative  $\epsilon_r$  de 300, un côté de  $55 \mu\text{m}$  et un pas de  $80 \mu\text{m}$ . On ne trace que la permittivité *effective* car seule la résonance électrique est observée. On remarque un écrasement rapide de cette résonance de Mie : la partie réelle n'est plus négative pour des pertes supérieures à 0,02 dans le premier cas et 0,01 dans le second cas. Nos structures étant sensibles au couplage, un rapport pas/côté plus petit donnera des résonances de Mie plus creusées. Afin d'avoir une certaine marge de manœuvre dans le choix de nos matériaux, nous fixons notre limite maximum de tangente de perte à 0,03.

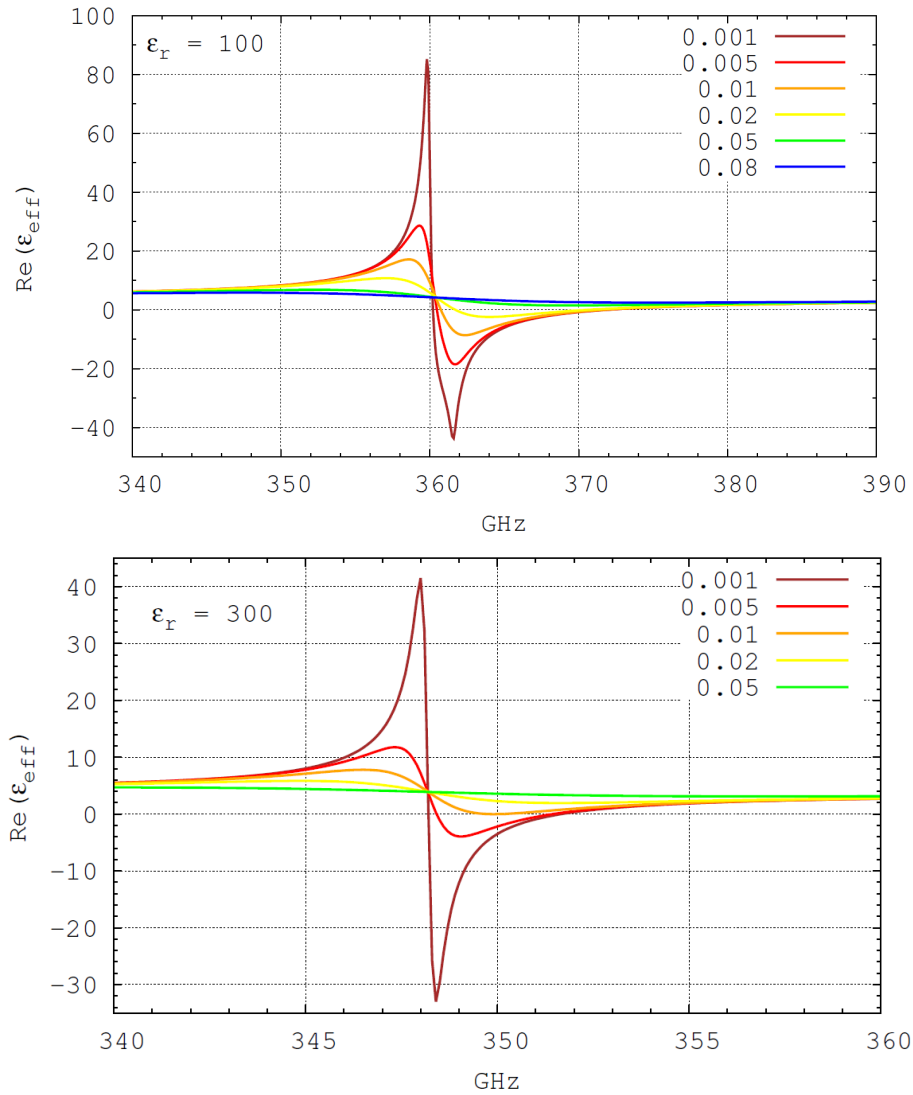


FIGURE III.1.1 – Évolution de la partie réelle de la permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  en fonction des pertes dans le matériau. Dans les deux cas, le résonateur est une tige diélectrique 2D de section carrée en polarisation TE et le rapport pas/côté est égal à 1,5. En haut, la partie réelle de la permittivité relative  $\epsilon_r$  vaut 100, en bas 300. On constate, dans les deux cas, une partie réelle positive pour  $\tan \delta > 0,02$  environ. On remarque également un écrasement rapide des résonances de Mie, et un écrasement quasi-total vers 0,05.

Ainsi, on se fixe comme condition sur les pertes :

$$\tan \delta \leq 0,03 \quad (\text{III.1.8})$$

Il existe néanmoins une troisième contrainte au térahertz, liée à la structure cristalline de nos matériaux, et c'est ce que nous allons voir maintenant.

## 2 Comportement des diélectriques au térahertz

L'objectif de cette thèse est de montrer le bon fonctionnement des résonateurs diélectriques aux fréquences térahertz. On l'a vu dans le chapitre précédent, la permittivité relative  $\epsilon_r$  de nos matériaux n'est pas une constante et dépend beaucoup de la fréquence, c'est d'autant plus vrai dans cette gamme et nous allons en expliquer les raisons.

### 2.1 Différentes contributions selon la fréquence

En réalité, la dépendance en fréquence de la permittivité relative est multi-factorielle et de ce fait assez complexe à décrire. Un milieu matériel contient en effet toujours un grand nombre de charges (ioniques, électroniques, etc.) et celles-ci sont toutes plus ou moins susceptibles de perturber un champ électromagnétique incident. Toutes ces charges vont ainsi contribuer, à leur échelle, à la polarisation totale du milieu en question. Cette partie se propose de décrire chacune de ces contributions.

Sur l'ensemble du spectre électromagnétique, on peut distinguer trois contributions principales : une contribution électronique, une contribution ionique et une contribution dipolaire. La figure III.2.1 schématise l'effet de chacune de ces contributions sur la polarisation totale  $\mathbf{P}$  d'un matériau cristallin en fonction de la gamme de fréquence considérée. La polarisation est reliée à la permittivité relative par la relation :

$$\mathbf{P}(\omega) = \epsilon_0[\epsilon_r(\omega) - 1]\mathbf{E}_l \quad (\text{III.2.1})$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide et  $\mathbf{E}_l$  le champ électrique local, comme décrit dans l'annexe A.

Les trois types de polarisation de la figure III.2.1 s'expliquent ainsi :

- A très haute fréquence (UV) seule la déformation du nuage électronique des atomes a un effet sur la polarisation du matériau. On parle dans ce cas de **polarisation électronique** et celle-ci s'accompagne de résonances. Pour plus de détail sur cette polarisation, voir la partie A.1 de l'annexe A.
- Aux fréquences intermédiaires, dans le proche et lointain infrarouge, ce n'est plus seulement le nuage électronique mais les atomes eux-mêmes qui vibrent par rapport à leur position d'équilibre dans le cristal (par convention, leur position d'équilibre est définie à 0 K). On parle dans ce cas de **polarisation ionique**. L'énergie de vibration du réseau cristallin est quantifiée et porte le nom de *phonon*, par analogie avec le photon.

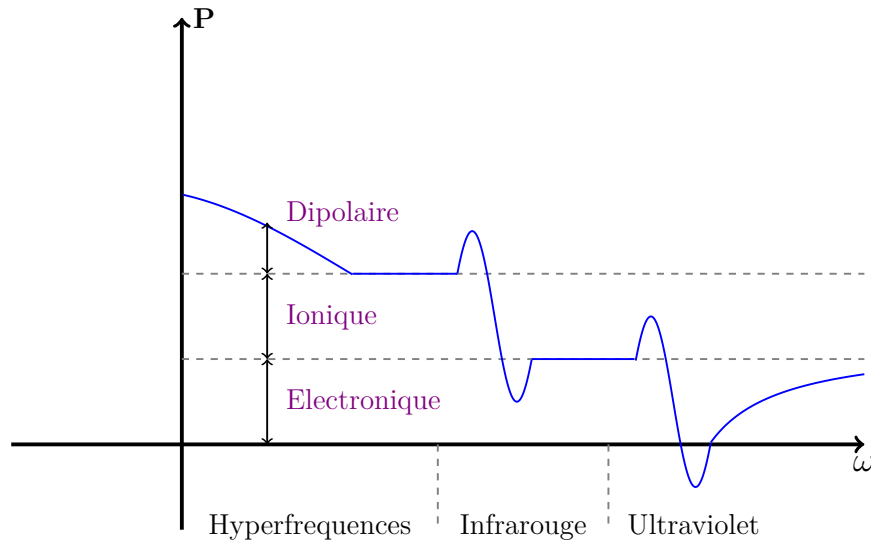


FIGURE III.2.1 – Représentation schématisique de la polarisation  $\mathbf{P}$  pour des matériaux cristallins (ou semi-cristallins). La polarisation dans l’ultraviolet est due à l’oscillation du nuage électronique des atomes autour de leur position d’équilibre. Dans la gamme infrarouge, la polarisation est principalement dictée par les phonons optiques de la structure cristalline. A plus basse fréquence, la polarisation peut encore augmenter à cause de certains micro-domaines du cristal, ou à cause de défauts dans la microstructure. Les céramiques que nous aborderons dans la partie suivante respectent toutes ce comportement.

On distingue deux types de phonons, schématisés sur la figure III.2.2, les phonons « acoustiques », lorsque les plus proches voisins vibrent en phase (comme lors d’une excitation sonore), et les phonons « optiques » lorsque cette vibration se fait en opposition de phase (comme lors d’une excitation lumineuse). Dans notre cas, seuls les phonons optiques sont stimulés, les autres n’étant pas sensibles aux OEM. Il existe plusieurs modèles pour décrire la permittivité liée à la vibration du réseau cristallin, nous les aborderons dans la partie 2.2 ci-dessous.

- Pour les basses fréquences, et dans les polycristaux exclusivement, c’est-à-dire les cristaux constitués de plusieurs domaines de tailles et d’orientations différentes, ce sont les fluctuations dipolaires qui dominant. On parle dans ce cas de **polarisation dipolaire** ou de **polarisation d’orientation**. Comme le décrit Tsurumi dans deux de ses articles, lors de la formation d’un diélectrique polycristallin il arrive que des micro-régions polarisées se forme de manière aléatoire dans le cristal [121], parfois même des nano-régions [122]. Selon les modèles, ces régions apparaissent suite à de légères différences de compositions au sein du cristal, ou à des fluctuations de température. Dans les pérovskites par exemple, ce sont les parois des domaines ferroélectriques qui sont responsables de la polarisation dipolaire. Il peut aussi exister un effet lié aux défauts au sein de la microstructure (joints de grains, inclusions, lacunes, insertions, etc.), bien que plus difficile à mettre en évidence et à modéliser.

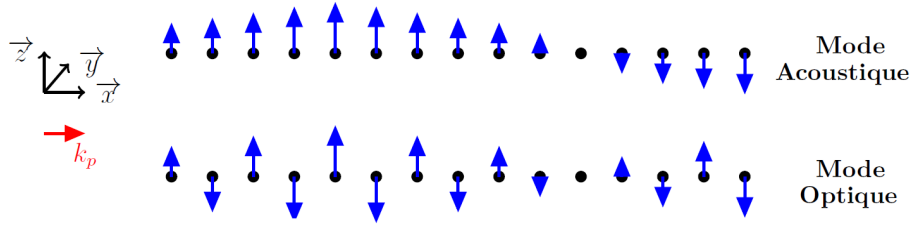


FIGURE III.2.2 – Représentation 3D de la différence entre un phonon transverse optique (TO) et un phonon transverse acoustique (TA). Dans un mode acoustique les plus proches voisins vibrent en phase, dans un mode optique les plus proches voisins sont en opposition de phase. Les points représentent les atomes de la maille dans leur position d'équilibre.

## 2.2 Modèles de permittivité au térahertz

Dans un cristal 3D, on définit trois modes de vibrations : un mode longitudinal (selon la direction de propagation  $k_p$  du phonon) et deux modes transverses (dans les deux autres directions de l'espace), comme le montre la figure III.2.3. Selon la symétrie de la structure, il est possible que certains modes soient dégénérés. Les phonons acoustiques (figure III.2.2) n'étant pas stimulés par une onde électromagnétique, ils n'interviennent pas dans les modèles suivants.

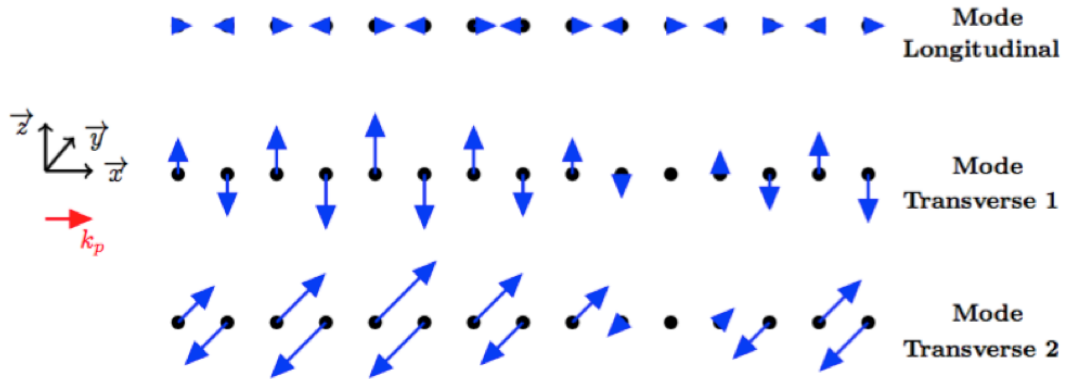


FIGURE III.2.3 – En 3D, le mode longitudinal et les deux modes transverses pour un phonon optique qui se déplace selon la direction  $\vec{x}$ . Les directions d'oscillations des modes, en bleu, suivent les trois directions de l'espace, représentées par le trièdre  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$  de gauche. Les points schématisent les atomes de la maille dans leur position d'équilibre.

Il existe plusieurs modèles capables de décrire l'effet des phonons optiques sur la permittivité relative  $\epsilon_r$ . Nous nous intéressons ici à deux d'entre eux : le modèle pseudo-harmonique et le modèle semi-quantique, dont la formulation diffère légèrement bien que les résultats soient semblables. Ces deux modèles sont toujours régulièrement utilisés.



### 2.2.1 Modèle Pseudo-harmonique (PH)

Ce modèle dérive de celui de l'oscillateur harmonique classique appliqué aux atomes du réseau cristallin lui-même. La démonstration de cette formule est lisible dans le Kittel, chapitre 14, page 369 [123]. Ce modèle est utile lorsqu'on ne connaît que le premier phonon transverse optique (TO1), où que l'on ignore la fréquence des phonons longitudinaux optiques (LO). La permittivité relative du matériau est ainsi reliée à la fréquence du premier phonon TO1 par la formule :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{\omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2 - j\gamma_{TO1}\omega} [\epsilon(0) - \epsilon(\infty)] \quad (\text{III.2.2})$$

où  $\epsilon(0)$  est la constante diélectrique statique (basse fréquence),  $\epsilon(\infty)$  la constante diélectrique optique (haute fréquence),  $\omega_{TO1}$  la fréquence du premier phonon transverse optique, et  $\gamma_{TO1}$  le terme d'amortissement du phonon associé.

Cette permittivité relative est résonante, son pôle se trouve en  $\omega_{TO1}$ , elle est schématisée sur la figure III.2.4. Le facteur d'amortissement  $\gamma_{TO1}$  correspond à la largeur à mi-hauteur de la partie imaginaire, en pointillé. A gauche sur la même figure est tracé un cas idéal, sans facteur d'amortissement, de la permittivité relative au niveau d'une résonance phonon  $\omega_T$ . On peut déterminer son zéro, noté  $\omega_L$ , il correspond à la fréquence du phonon longitudinal optique [123].

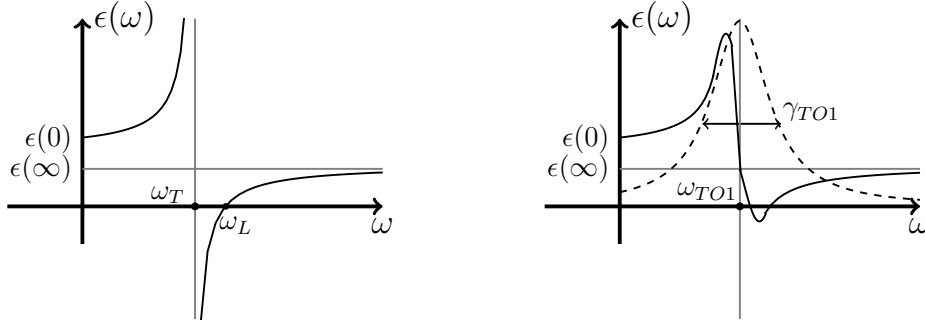


FIGURE III.2.4 – A gauche : représentation générale de la permittivité relative résonante au niveau d'un phonon optique de fréquence  $\omega_T$ , sans facteur d'amortissement ( $\gamma = 0$ ). Le zéro de la permittivité se trouve en  $\omega_L$ . La zone entre  $\omega_T$  et  $\omega_L$  correspond à une bande interdite où les ondes ne se propagent pas. A droite, cas particulier avec le premier phonon transverse optique  $\omega_{TO1}$  et un facteur d'amortissement  $\gamma_{TO1}$ .

Cette formule suffit dans la plupart des cas puisque la permittivité à basse fréquence est dominée par le premier phonon TO1 [124, 125]. Néanmoins, pour une meilleure précision, il est souvent utile de connaître la contribution des autres phonons. La formule (III.2.2) est ainsi généralisable pour un nombre  $j$  de phonons optiques. On utilise dans ce cas :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \sum_{j=1}^n \frac{S_j \omega_{TOj}^2}{\omega_{TOj}^2 - \omega^2 - i\gamma_{TOj}\omega} \quad (\text{III.2.3})$$

avec  $n$  le nombre maximum de phonons optiques considérés,  $S_j$ ,  $\omega_{TOj}$  et  $\gamma_{TOj}$  la force d'oscillation, la fréquence et la terme d'amortissement du  $j$ -ième phonon optique, respectivement. Dans ce cas, on a :

$$\epsilon(0) - \epsilon(\infty) = \sum_{j=1}^n S_j \quad (\text{III.2.4})$$

### 2.2.2 Modèle semi-quantique (SQ)

Le modèle semi-quantique (SQ), souvent désigné dans la littérature par l'acronyme FPSQ (*Four-parameter semi-quantum model*), est une manière alternative de se représenter les résonances phonons, apparue assez tôt dans le domaine [126, 127]. Ce modèle prend en compte non seulement les phonons optiques transverses, mais aussi les phonons optiques longitudinaux, et s'écrit de cette façon :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \prod_{j=1}^n \frac{\omega_{LOj}^2 - \omega^2 + i\gamma_{LOj}\omega}{\omega_{TOj}^2 - \omega^2 + i\gamma_{TOj}\omega} \quad (\text{III.2.5})$$

avec  $n$  le nombre maximum de phonons optiques considérés,  $\omega_{LOj}$ ,  $\omega_{TOj}$ ,  $\gamma_{LOj}$  et  $\gamma_{TOj}$  respectivement les fréquences des  $j$ -ième phonons optiques longitudinaux, transversaux, et leur terme d'amortissement associés.

Ce modèle est en pratique plus proche de la réalité, surtout pour les cristaux ayant un grand nombre de phonons [128]. L'avantage est qu'il ne nécessite pas de connaître la force d'oscillation du phonon (les  $S_j$  de la formule (III.2.3)), ni la permittivité à basse fréquence  $\epsilon(0)$ . Néanmoins il nécessite de connaître la fréquence de tous les phonons optiques longitudinaux et transverses du matériau, le premier ne suffisant pas à décrire correctement la permittivité relative. On peut le comprendre en raison du produit que la formule impose.

### 2.2.3 Comparaison des deux modèles précédents

Pour comparer ces deux modèles et savoir lequel des deux est le plus précis pour notre problème, nous les avons testés sur les deux matériaux les plus étudiés au cours de cette thèse : le  $\text{TiO}_2$  et le  $\text{SrTiO}_3$ . Ces matériaux étant connus de longue date, la bibliographie est abondante à leur sujet, nous le verrons en détail dans les parties 3.1 et 3.2 associées.

Pour connaître la fréquence (et le facteur d'amortissement) des phonons optiques du  $\text{TiO}_2$ , nous avons utilisés les valeurs de Matsumoto, mesurée sur un monocristal rutile<sup>5</sup> par réflexion FIR (*Far-Infrared*) à température ambiante [130]. Les deux courbes de la figure III.2.5 utilisent les valeurs de fréquences phonons du tableau 2.

Les initiales SQ désignent le modèle semi-quantique et les initiales PH le modèle pseudo-harmonique. Dans le cas du  $\text{TiO}_2$ , les forces d'oscillations des phonons sont

5. Chaque octaèdre  $\text{TiO}_6$  partage deux arrêtes opposées avec les octaèdres adjacents formant des chaînes selon l'axe  $c$ . Chaque chaîne est reliée à quatre chaînes voisines par mise en commun de sommets [129].

Phonons	$\omega$ (THz)	$\gamma$ (THz)
TO1	5,70	0,70
TO2	11,4	0,57
TO3	15,1	0,57
TO4	17,5	1,95
LO1	24,6	1,50
LO2	10,9	0,27
LO3	13,3	0,66
LO4	17,3	1,95

TABLE 2 – Fréquence  $\omega$  et facteur d'amortissement  $\gamma$  des phonons transverses optiques du  $\text{TiO}_2$  issus des mesures de Matsumoto [130].

inconnues, le calcul via le modèle pseudo-harmonique ne peut se faire qu'avec l'équation à un seul phonon (III.2.2) et donne des résultats en légers désaccords avec le modèle semi-quantique de l'équation (III.2.5), comme on le voit sur la figure III.2.5.

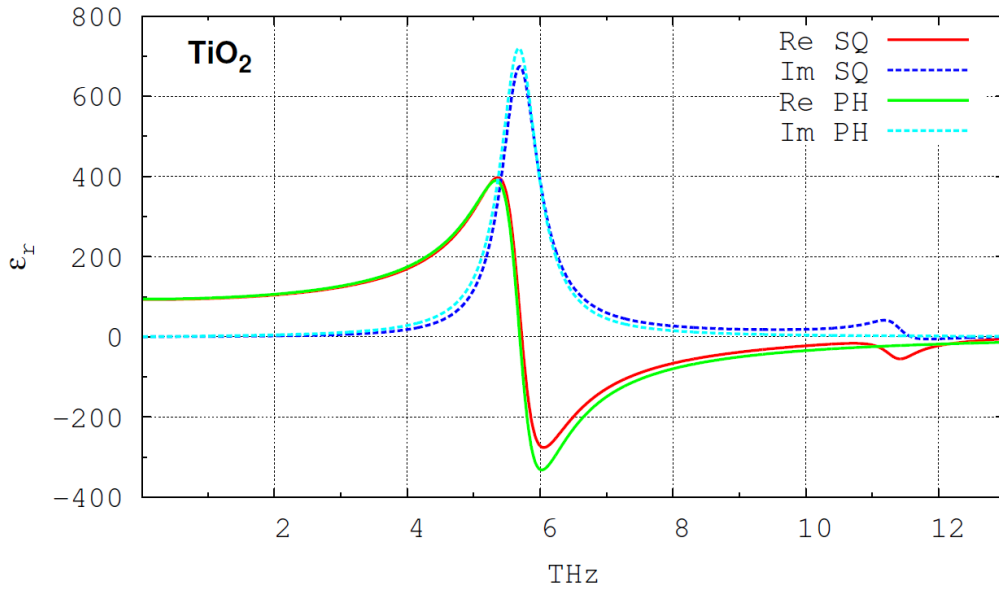


FIGURE III.2.5 – Comparaison du modèle pseudo-harmonique à un seul phonon (équation (III.2.2)) et semi-quantique (équation (III.2.5)) pour un monocristal de  $\text{TiO}_2$ . Dans la gamme où nous allons travailler ( $< 2$  THz) les modèles sont semblables.

Concernant le  $\text{SrTiO}_3$ , nous avons utilisé à la fois les valeurs de A.S. Barker (pour les phonons TO2 et LO2) [131] et de W.G. Spitzer (pour les autres phonons) [132] qui donnent des valeurs similaires et sont souvent cités en référence dans le domaine [133]. Dans les deux cas, les mesures sont faites sur un monocristal de  $\text{SrTiO}_3$  par réflexion FIR à température ambiante [132]. Connaissant les forces d'oscillations  $S_j$  des phonons du  $\text{SrTiO}_3$ , le calcul pseudo-harmonique via l'équation (III.2.3) est possible. Cette force d'oscillation est mesurée indirectement, via la mesure de ce que les auteurs nomment la *charge* de la résonance,  $Z_j$ , reliée à la force d'oscillation par :

$$S_j = \frac{4\pi Z_j^2}{\omega_j^2} \quad (\text{III.2.6})$$

Le tableau 3 répertorie les valeurs de phonons optiques du STO utilisées pour les deux modèles :

Phonons	$\omega$ (THz)	$\gamma$ (THz)	$Z_j$ (THz)
TO1	2,70	0,60	13,1
TO2	5,27	0,09	2,82
TO3	7,94	0,03	0
TO4	16,31	0,33	5,76
LO1	5,13	0,03	0,14
LO2	7,94	0,07	0
LO3	14,18	0,07	3,66
LO4	24,43	0,06	14,12

TABLE 3 – Fréquence  $\omega$ , facteur d'amortissement  $\gamma$  et charge  $Z$  des phonons transverses optiques du  $\text{SrTiO}_3$  issus des mesures de Barker [131] et Spitzer [132].

La comparaison des deux modèles théoriques est visible sur la figure III.2.6. On constate un meilleur accord que précédemment entre les deux, sauf au niveau du second phonon transverse optique, dont le traitement est différent. A nos fréquences de travail, entre 0,2 et 0,5 THz, ces deux modèles donnent des résultats identiques, la différence de traitement sur le second phonon optique ne nous concerne donc pas.

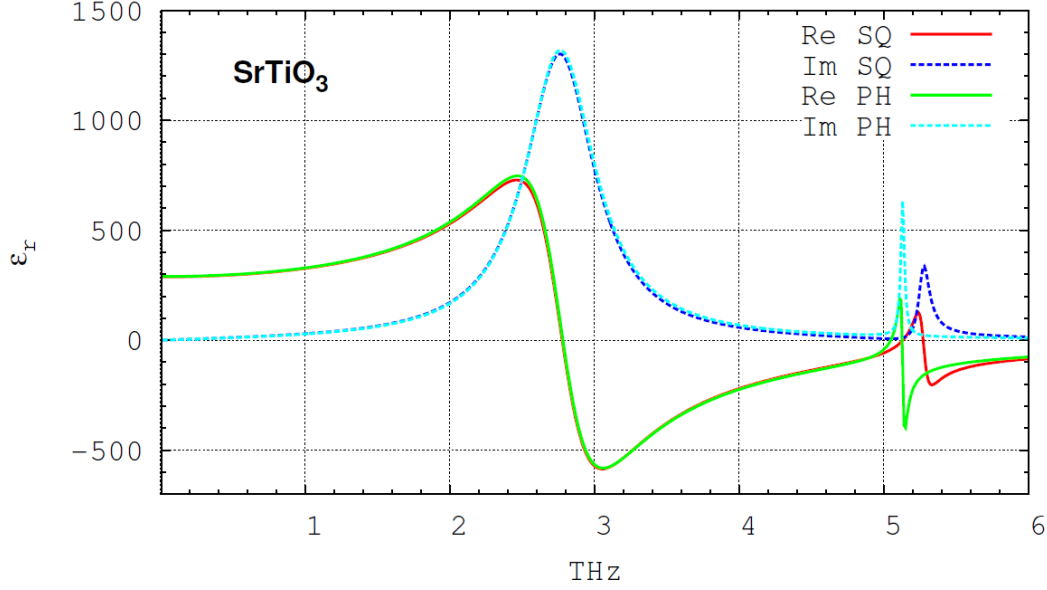


FIGURE III.2.6 – Comparaison du modèle pseudo-harmonique à plusieurs phonons (équation (III.2.3)) et semi-quantique (équation (III.2.5)) pour un monocristal de  $\text{SrTiO}_3$ . Dans la gamme où nous travaillons ( $< 2$  THz) les modèles sont semblables.

### 3 Matériaux étudiés dans la gamme Téraherztz

D'après les critères développés ci-dessus, une série de matériaux diélectriques a été étudiée, chacun étant susceptible de permettre l'apparition d'un indice négatif au téraherztz. Nous avons regroupé ici les résultats bibliographiques marquants pour chacun d'entre eux. Un récapitulatif en fin de chapitre illustre pourquoi certains sont plus adaptés à notre problème que d'autres.

#### 3.1 Dioxyde du Titane ( $\text{TiO}_2$ )

Le  $\text{TiO}_2$  a été un des premiers matériaux utilisés en tant que résonateur diélectrique. Il fut redécouvert en 1962 par Okaya et Barash [54] lors de leurs recherches sur des matériaux à haut facteur de qualité<sup>6</sup>. Ce qui néanmoins limitait les applications fut sa mauvaise stabilité en température ( $\tau_f$ <sup>7</sup> = + 450 ppm/K [56]), limite que possèdent la plupart des diélectriques à haute permittivité relative. On voit néanmoins, d'après Berdel *et al.* [134] sur la figure III.3.1, que cette sensibilité reste mesurée. Elle affecte en effet la partie réelle de la permittivité relative, qui varie de  $\pm 10\%$  de 173 à 323 K, mais cette permittivité n'augmente que très légèrement à une température donnée sur la gamme 0,2-0,8 THz. De plus, les pertes ( $\tan \delta$ ) ne dépendent quasiment pas de la

6. Le facteur de qualité  $Q$  d'un système est, en électronique, une mesure sans unité du taux d'amortissement d'un oscillateur. Il est souvent pris comme l'inverse de la tangente de perte. Plus celui-ci est grand, plus la résonance est fine, avec une forte amplitude [56].

7. Le coefficient en température quantifie la variation relative de la permittivité en fonction de la température. Son expression est :

$$\tau_f = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T}$$

température, varient linéairement, et restent relativement faibles ( $\tan \delta < 0,03$  jusqu'à 0,5 THz).

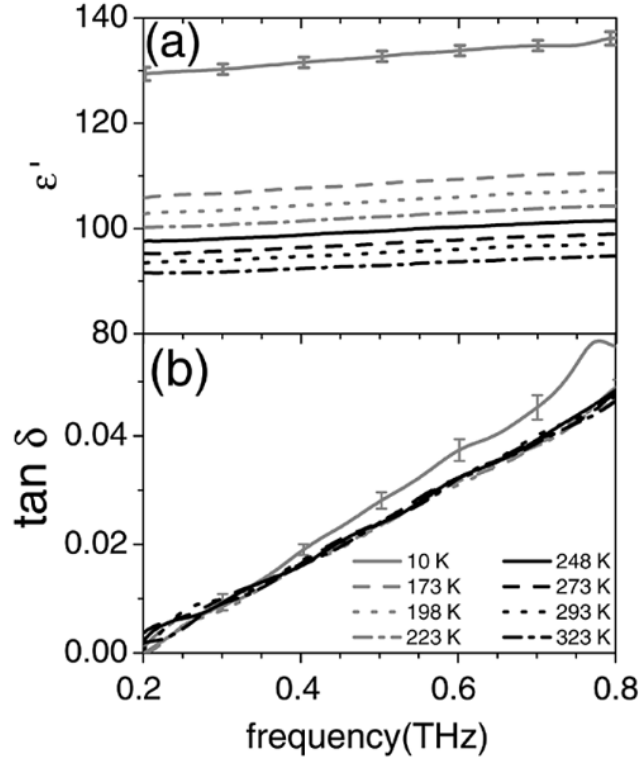


FIGURE III.3.1 – Partie réelle de la permittivité et tangente de perte d'un échantillon de  $\text{TiO}_2$  en entrée de gamme térahertz et en fonction de la température. La structure cristalline n'est pas spécifiée dans l'article. On remarque la faible augmentation de  $\epsilon'$  sur l'ensemble de la gamme à température ambiante, et les faibles pertes ( $\tan \delta \approx 0,01$  à 0,3 THz) [134].

Matsumoto *et al.* ont aussi étudié ce matériau en 2008, avec des mesures THz-TDS (*Time-Domain Spectroscopy*) à température ambiante sur des monocristaux et polycristaux de  $\text{TiO}_2$  allant jusqu'à  $100 \text{ cm}^{-1}$  (3 THz) et extrapolé avec un modèle semi-quantique [130]. Ses mesures, visibles sur la figure III.3.2, mettent en évidence, comme Berdel plus haut, la faible augmentation de  $\epsilon'_r$  en dessous de  $50 \text{ cm}^{-1}$  (1,5 THz). Les pertes sont en revanche difficilement lisibles. On visualise également le premier phonon optique vers 5,7 THz ( $\approx 189 \text{ cm}^{-1}$ ), position déjà relevée chez Spitzer *et al.* en 1962 [132]. Cette fréquence constitue une barrière supérieure pour nos applications térahertz à base de  $\text{TiO}_2$ .

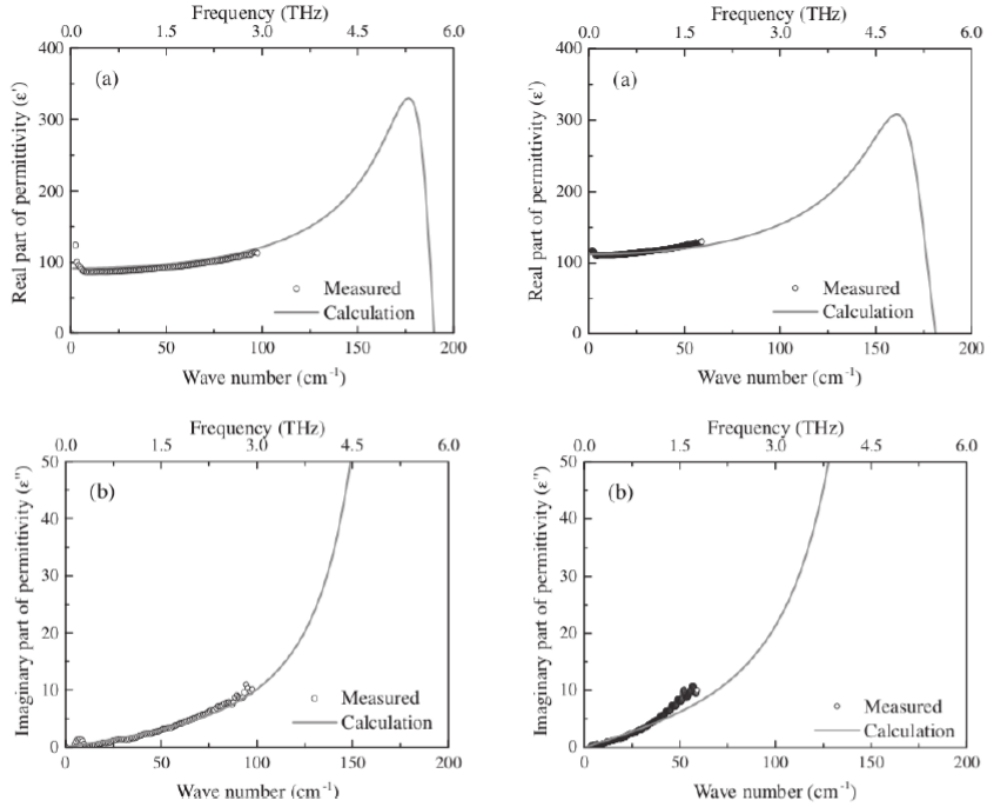


FIGURE III.3.2 – À gauche : partie réelle et imaginaire de la permittivité d'un monocristal de  $\text{TiO}_2$  de 0,1 à 6 THz ( $200 \text{ cm}^{-1}$ ), les points représentent les mesures THz-TDS jusqu'à 3 THz ( $100 \text{ cm}^{-1}$ ), le trait plein le modèle semi-quantique. À droite, les mêmes mesures mais sur un polycristal de  $\text{TiO}_2$ . Dans les deux cas, la permittivité relative a le bon ordre de grandeur et le premier phonon optique TO1 est haut en fréquence, à 5,7 THz ( $189 \text{ cm}^{-1}$ ) [130].

Tant au niveau de la permittivité relative ( $\epsilon_r \approx 100$  à température ambiante) que des pertes ( $\tan \delta < 0,03$  en entrée de gamme térahertz), le  $\text{TiO}_2$  est un diélectrique qui respecte nos conditions d'apparitions des résonances de Mie, ce qui en fait un bon candidat pour nos applications.

### 3.2 Titanate de Strontium ( $\text{SrTiO}_3$ )

Le  $\text{SrTiO}_3$  (STO) est une céramique abondamment étudiée, tout comme le  $\text{TiO}_2$  ci-dessus. Les premières études sur ce diélectrique ont été faites en 1961 par Rupprecht *et al.*, il essayait alors de comprendre les mécanismes responsables des très faibles pertes observées dans la gamme micro-ondes [53].

Comme beaucoup de matériaux à haute permittivité, le STO est très sensible à la température (coefficient en température  $\tau_f$  de +1600 ppm/K [56]), limitant de fait son utilisation pratique. On peut citer l'étude de Misra *et al.* sur une couche mince<sup>8</sup>

8. Un échantillon de moins d'un micromètre d'épaisseur

de  $\text{SrTiO}_3$  de 650 nm d'épaisseur qui montre la grande dépendance de la permittivité en fonction de la température [135]. Cette sensibilité a longtemps posé problème aux personnes utilisant des diélectriques. Elle trouve en partie son explication dans la grande sensibilité à la température du réseau cristallin lui-même, plus particulièrement à cause de l'affaiblissement du premier phonon optique, le plus bas en fréquence : le phonon transverse optique TO1, dont Petzelt *et al.* a étudié l'affaiblissement en fréquence en fonction de la température. Les résultats de cette étude sont visibles sur la figure III.3.3 [136].

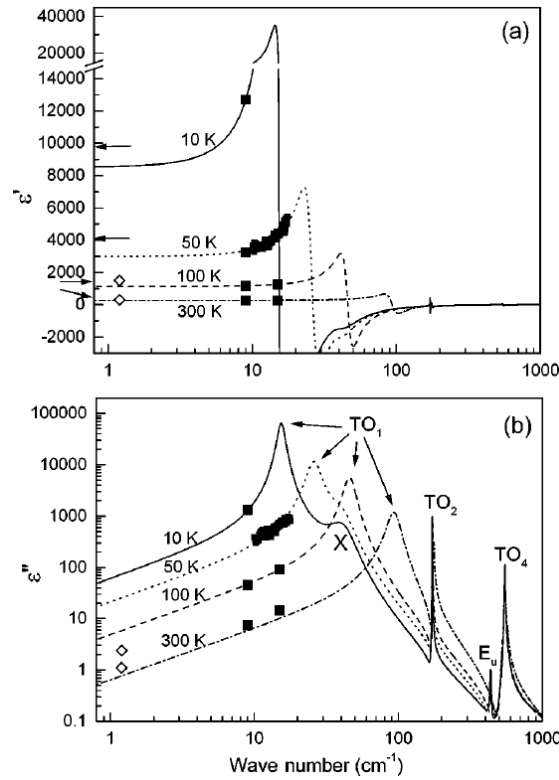


FIGURE III.3.3 – Parties réelle et imaginaire de la permittivité d'un polycristal massif de  $\text{SrTiO}_3$  en fonction de la température sur la gamme [30 - 30 000] THz ([1 - 1000]  $\text{cm}^{-1}$ ). On remarque la très grande sensibilité du premier phonon optique TO1, se déplaçant de 3 THz ( $100 \text{ cm}^{-1}$ ) à 300 K jusqu'à environ 0,3 THz ( $10 \text{ cm}^{-1}$ ) à 10 K, faisant passer la permittivité basse fréquence de 300 à plus de 8000 environ. La partie imaginaire augmente quasiment de deux ordres de grandeurs pour le même écart en température [136].

A température ambiante, la position en fréquence de ces phonons optiques est connue depuis longtemps, les mesures par réflectivité de Spitzer *et al.* en 1962 [132], ou celles de Barker *et al.* en 1966 [131] donnent des résultats quasi-identiques pour du STO monocristallin. La présence du premier phonon optique est à environ 2,7 THz ( $88 \text{ cm}^{-1}$ ), cette valeur est aussi confirmée par de nombreux résultats de mesures plus récents [133, 137, 138]. La figure III.3.4 reprend les résultats de mesures par THz-TDS de Matsumoto et montre une bonne adéquation entre les mesures et le modèle théorique semi-quantique (équation III.2.5) [138].



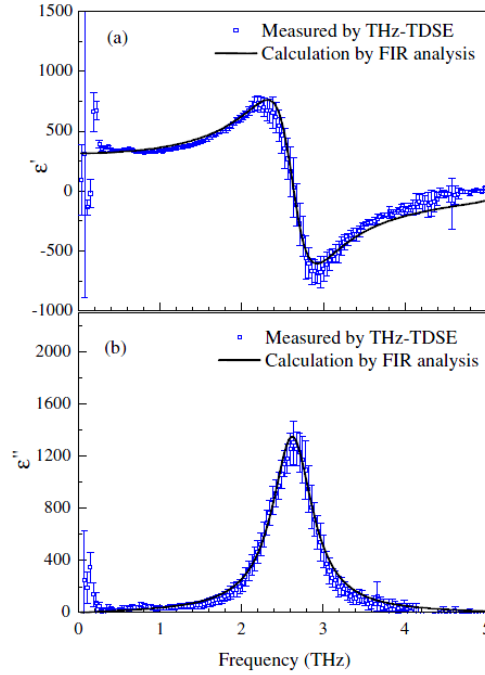


FIGURE III.3.4 – Permittivité relative d’un monocristal massif de STO mesurée par Matsumoto *et al.* à température ambiante. On constate une très bonne adéquation entre les mesures et le modèle semi-quantique utilisé. La partie réelle respecte nos conditions ( $\text{Re}(\epsilon_r) > 100$ ) mais la partie imaginaire est difficilement lisible dans la gamme où l’on souhaite travailler [138].

Les mesures large bande de Tsurumi à température ambiante, visibles sur la figure III.3.5, montrent que pour des fréquences de moins de 1 THz environ, il y a une grande stabilité de la permittivité du STO [122]. Stabilité confirmée par Han *et al.* sur la gamme [0,2-1] THz (figure III.3.6) pour une poudre non frittée (c’est-à-dire non densifiée), une couche mince (650 nm d’épaisseur) et un monocristal de STO [125]. Ces résultats montrent également l’effet de la configuration extérieure de l’échantillon sur l’indice de réfraction. Bien que l’indice reste constant sur la gamme étudiée, il y a des disparités non-négligeables selon que l’on utilise une poudre (indice de réfraction de 18), un monocristal (indice de réfraction de 19,2) ou une couche mince de 650 nm d’épaisseur (indice de réfraction de 14). La configuration extérieure de l’échantillon a donc son importance.

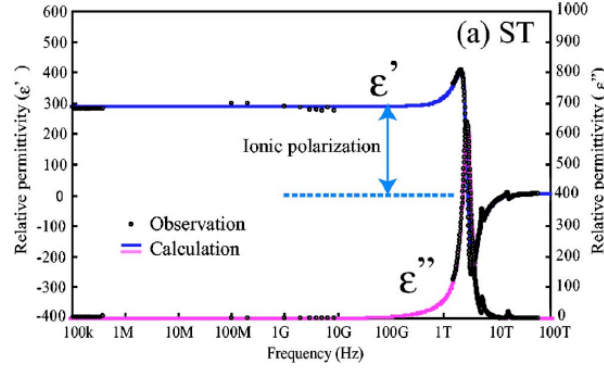


FIGURE III.3.5 – Permittivité d'une poudre frittée de STO sur une très large bande de fréquence à température ambiante. Les points noirs sont des mesures (spectromètre FIR au térahertz, analyseurs d'impédances à plus basse fréquence) les courbes bleue et violette sont des modèles théoriques : un modèle semi-quantique au térahertz et un modèle empirique tenant compte (ou non) de la polarisation dipolaire à plus basse fréquence [122].

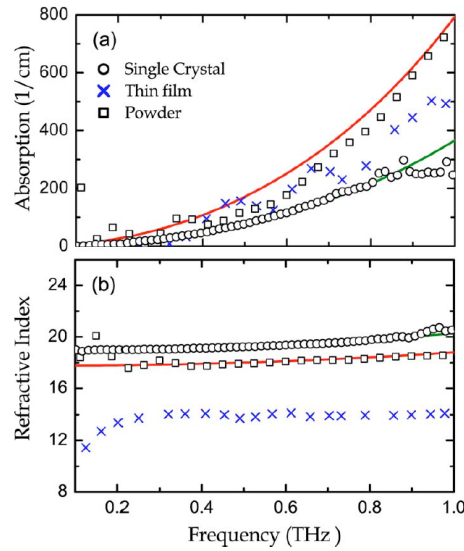


FIGURE III.3.6 – Absorption et indice de réfraction du STO dans le cas d'un monocristal (ronds), d'une poudre (carrés) et d'une couche mince de 650 nm d'épaisseur (croix). Les traits pleins représentent le modèle pseudo-harmonique utilisé pour extrapoler les résultats de la poudre et du monocristal. On remarque une faible dépendance en fréquence de l'indice sur la gamme considérée mais un fort effet de la configuration extérieure de l'échantillon, malgré l'utilisation de la même céramique à l'intérieur [125].

Malgré un coefficient en température important, et cette précaution à prendre sur la forme de l'échantillon, on remarque chez Nemec *et al.* que des mesures TDS sur un monocristal de STO à température ambiante montrent encore une fois une permittivité suffisamment élevée ( $\epsilon_r \approx 300$  à 300K) et surtout une tangente de perte suffisamment faible ( $\tan \delta < 0,02$ ), comme on le voit sur la figure III.3.7, en haut, en insert [139]. Précisons que ces mesures sont faites à 0,2 THz, soit un peu en dessous de la fréquence

de fonctionnement que nous souhaiterions avoir. Toujours sur la figure III.3.7, en bas, Nemec *et al.* montrent en 2009 la possibilité d'avoir une perméabilité négative vers 0,3 THz avec des tiges de STO, confirmant l'idée que ce matériau est un bon candidat pour nos dispositifs [33].

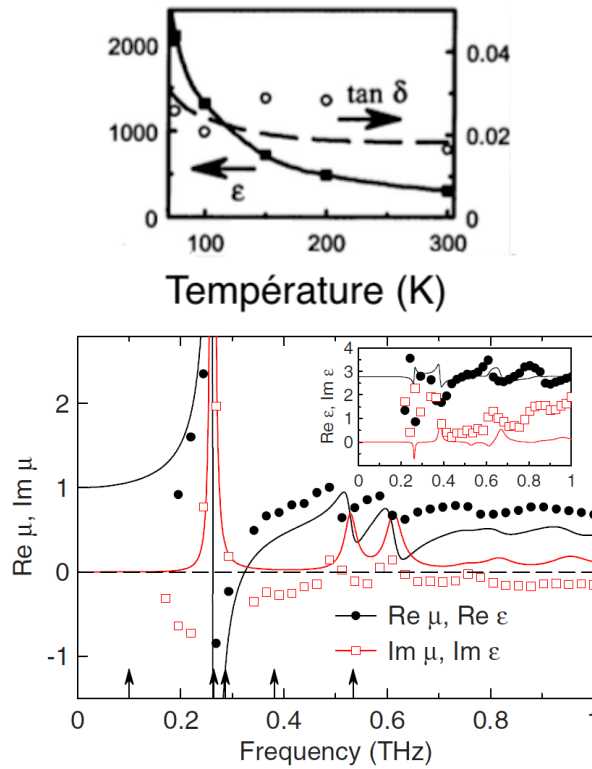


FIGURE III.3.7 – En haut : partie réelle de la permittivité  $\epsilon_r$  du STO ayant pour valeur 300 à 300K et une tangente de perte de 0,02, soit inférieure à la limite que nous nous sommes fixés. Les points représentent des mesures, les courbes sont des extrapolations de données [139]. En bas la perméabilité *effective* et en insertion la permittivité *effective* de tiges micrométriques de STO. On distingue les résonances de Mie successives, identifiées dans l'article en question, avec une perméabilité négative vers 0,3 THz. L'équivalent pour la permittivité n'est pas observé [33].

Le STO ne pourra donc pas s'utiliser trop haut en fréquence du fait d'un premier phonon optique assez bas en fréquence (2,7 THz). Sa tangente de perte reste cependant inférieure à 0,03 en entrée de gamme térahertz, et sa permittivité relative est largement au-dessus de 100, ce qui en fait un bon candidat pour nos applications térahertz.

### 3.2.1 Caractérisation d'échantillons de $\text{SrTiO}_3$

Au cours de cette thèse, plusieurs échantillons de STO ont été fabriqués, conjointement par le CIRIMAT de Toulouse pour la conception des poudres, et le SPCTS de Limoges pour le frittage et la mise en forme. Leur permittivité a été mesurée par le Laboratoire Pierre Aigrain (LPA) à Paris. Les premiers échantillons intéressants sont répertoriés dans le tableau 4 ci-dessous. Ils ont des noms différents car ils ne correspondent pas à la même « fournée », mais ont été réalisés avec la même stœchiométrie et dans les

mêmes conditions de frittage. Cette variabilité s'observe systématiquement, malgré des conditions expérimentales identiques. Les échantillons sont tous des pastilles massives de STO (plusieurs dizaines voire centaines de microns d'épaisseurs au minimum).

La méthode de spectroscopie térahertz du LPA permet en théorie de faire des mesures jusqu'à 2 THz. Cependant, en raison d'une trop grande absorption, liée aux pertes dans les échantillons, le signal de transmission s'atténue rapidement et les mesures n'ont jamais pu dépasser les 1,2 THz dans le cadre de cette thèse.

Ce souci est visible dès les premières mesures du LPA. La figure III.3.8 reprend certaines mesures de permittivité relative pour deux pastilles de STO d'épaisseur 120  $\mu\text{m}$  et 350  $\mu\text{m}$ . On le voit, la gamme de fréquence mesurée est courte, la partie réelle de  $\epsilon_r$  est quasiment égale à sa partie imaginaire, on est donc très éloigné du modèle théorique pseudo-harmonique (à droite sur la figure III.3.8). De plus, pour ces dimensions,  $\epsilon_r$  n'est pas censée dépendre de l'épaisseur de l'échantillon. Il s'est avéré par la suite, via une étude a posteriori, que les deux échantillons avaient une porosité trop importante, d'où ce désaccord avec les valeurs théoriques.

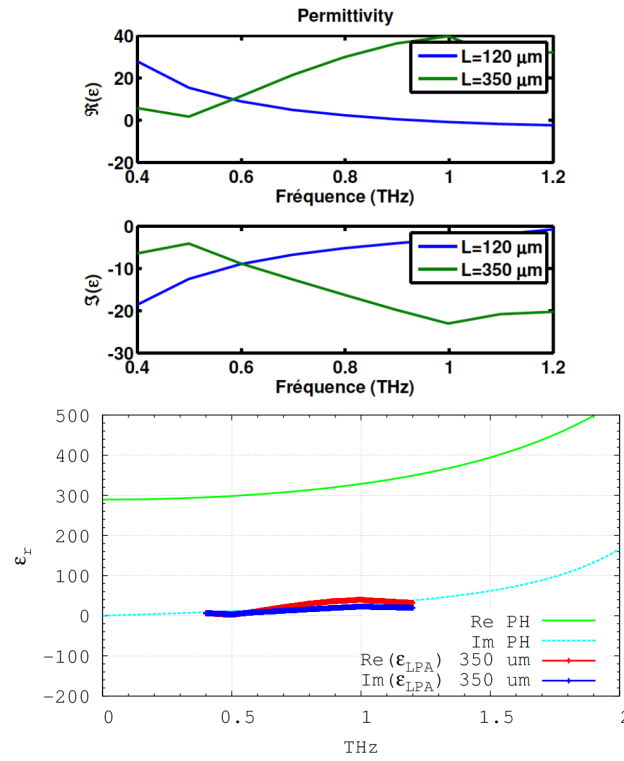


FIGURE III.3.8 – En haut : premières mesures par le LPA de la permittivité relative  $\epsilon_r$  de deux échantillons de STO d'épaisseur  $L$  différente. En bas, ces mêmes mesures pour  $L = 350 \mu\text{m}$  comparées à la permittivité du modèle pseudo-harmonique (PH) de la partie 2.2.1. Nous voyons trois problèmes : la gamme de fréquence mesurée est courte, les mesures sont très éloignées du modèle théorique pseudo-harmonique (en bas) et elles ne sont pas censées dépendre de l'épaisseur de l'échantillon (en haut). Cet écart trop important avec la théorie a mené nos collaborateurs à vérifier la porosité des échantillons, ce qui s'est avéré être la source du problème.

En plus d'un problème de porosité sur les premiers échantillons côté CIRIMAT, et d'un problème sur le protocole expérimental du LPA pour déterminer les propriétés optiques des matériaux diélectriques, d'autres problèmes, liés à la fabrication des échantillons eux-mêmes, se sont posés côté SPCTS. En effet, premièrement, les échantillons devaient être amincis pour être caractérisés (de l'ordre de la centaine de micromètres) sans quoi l'absorption devenait trop importante. Une céramique étant un matériau fragile, cette étape était délicate à réaliser. Deuxièmement, l'étape de mise en forme des céramiques par stéréolithographie ou ablation laser a rencontré beaucoup de difficultés et ne respectait pas nos critères de précisions pour des dispositifs à base de STO, ce qui a considérablement ralenti leur fabrication au térahertz.

Les mesures plus récentes ci-dessous font parties des mesures les plus proches des modèles théoriques que nous ayons, c'est pourquoi un certain nombre de simulations sont faites avec les caractéristiques de l'échantillon AQ 100 dans le chapitre IV. Certaines mesures de permittivité relative  $\epsilon_r$  et de tangente de perte ( $\tan \delta$ ) sont regroupées dans le tableau 4 pour différents échantillons. Les valeurs inscrites sont celles prises à 0,3 THz. Elles s'étendent sur toute la gamme  $[0,3 - 0,7]$  THz et sont comparées au modèle pseudo-harmonique de l'équation (III.2.3) sur la figure III.3.9.

Echantillon	$\epsilon_r$	$\tan \delta$
AQ 35	288	0.06
AQ 36	220	0.08
AQ 100	298	0.03
AQ 101	287	0.06

TABLE 4 – Récapitulatifs de mesures du LPA sur la permittivité relative d'échantillons de STO faites à 0,3 THz. Les échantillons AQ 100 et AQ 101 ont la permittivité relative  $\epsilon_r$  la plus proche du modèle théorique. Les mesures de permittivité relative des échantillons AQ 100 et AQ 101 sont tracées en entiers sur la figure III.3.9.

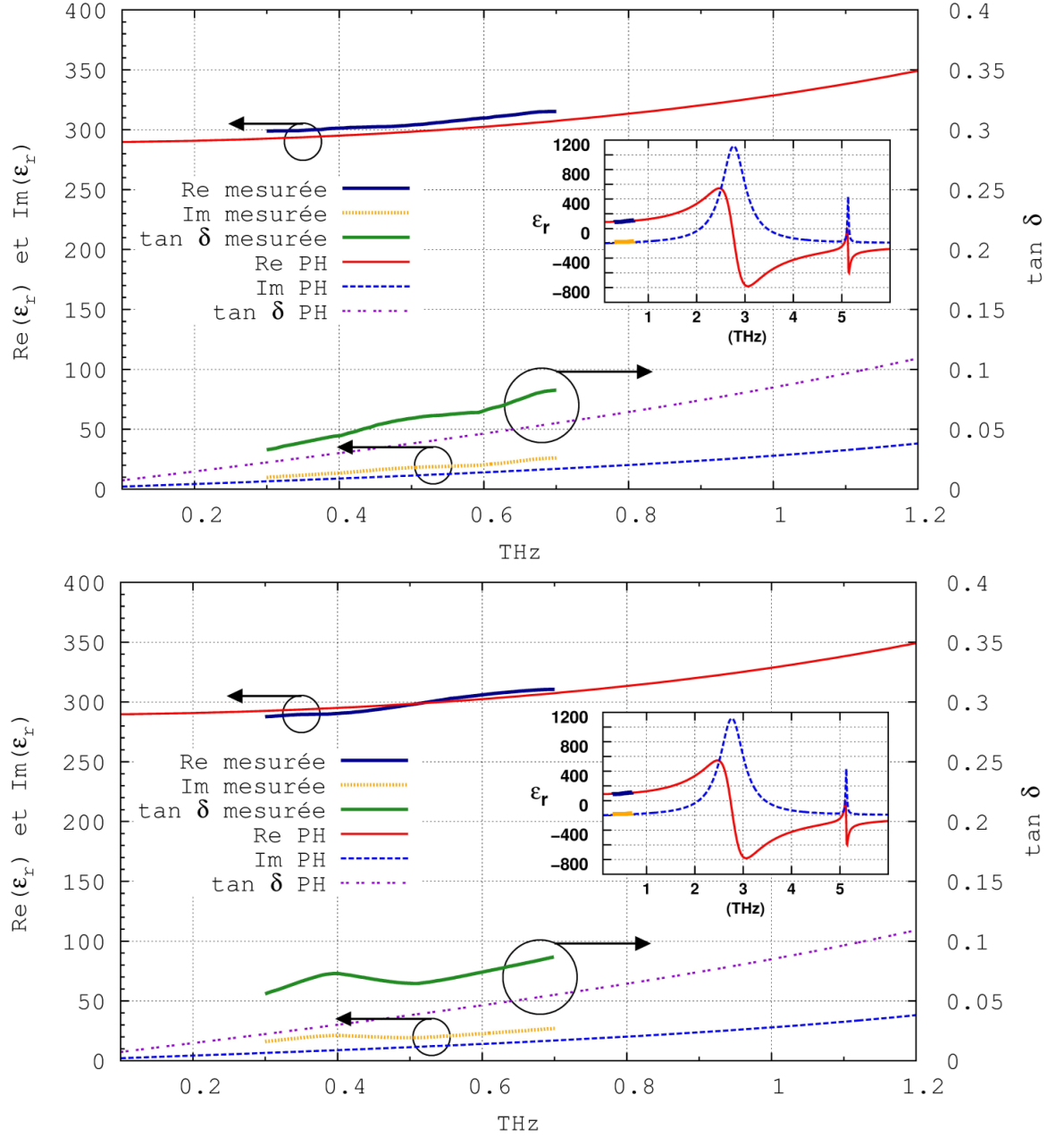


FIGURE III.3.9 – Mesures THz par le LPA sur deux échantillons de STO fabriqués conjointement par le SPCTS de Limoges et le CIRIMAT de Toulouse. **En haut AQ 100, en bas AQ 101** du tableau 4. En insertion, la gamme de fréquence est étendue jusqu'à 6 THz afin de voir la position des deux premiers phonons optiques TO1 et TO2. Le modèle utilisé pour la comparaison est le modèle pseudo-harmonique à plusieurs phonons (partie 2.2.1), on note une très bonne concordance des mesures avec le modèle, avec cependant des pertes ( $\tan \delta$ ) plus importantes.

### 3.3 Titanate de Baryum ( $\text{BaTiO}_3$ ) et dérivés

Le  $\text{BaTiO}_3$  (BT) et ses dérivés font partis de la famille des pérovskites, oxydes cristallins de formule chimique  $\text{ABO}_3$  où A désigne les cations aux coins de la maille et B le cation au centre de la maille, les atomes d'oxygène occupent eux le centre des faces. Ces structures sont connues pour leurs propriétés ferroélectriques (forte polarisation spontanée) permettant d'atteindre une permittivité relative importante. Les matériaux ayant cette structure cristalline sont largement répandus dans la littérature, le BT est par exemple utilisé en tant que céramique de base pour des condensateurs multicouches. Les pérovskites de type  $\text{Ba}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$  (BZT) sont utilisés pour leur très haute permittivité basse fréquence. Les pérovskites de type  $(\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x})\text{TiO}_3$  (BST) pour leur très haute permittivité au gigahertz (on parle parfois de permittivité « géante »).

La figure III.3.10 donne un aperçu de la permittivité de plusieurs de ces matériaux sur une très large gamme de fréquence à 300 K. Le graphique du haut montre la permittivité relative du BT, le graphique du centre celle du BZT de composition  $\text{Ba}(\text{Zr}_{0.25}\text{Ti}_{0.75})\text{O}_3$ , le graphique du bas celle du BST de composition  $(\text{Ba}_{0.6}\text{Sr}_{0.4})\text{TiO}_3$  [122]. Ces mesures montrent l'effet de la polarisation dipolaire (partie 2.1) à basse fréquence, responsable en grande partie de la haute permittivité relative de ces matériaux ( $\epsilon' \gg 100$ ) jusqu'aux fréquences gigahertz. On observe aussi, systématiquement, un effondrement de la permittivité en entrée de gamme térahertz (entre 100 GHz et 1 THz) à cause de la disparition de cette polarisation dipolaire [122]. La polarisation ionique prend alors le dessus, particulièrement dans le cas du BST dont la permittivité relative reste élevée. Cette polarisation ionique, due aux résonances phonons, est particulièrement visible sur chaque graphes (partie imaginaire  $\epsilon''$  de forme lorentzienne). Le premier phonon optique participe ainsi à l'augmentation des pertes au térahertz.

D'autres travaux au térahertz confirment cette limite. Par exemple, pour le BST, Petzelt *et al.* montrent sur des couches minces de  $\text{Ba}_{0.1}\text{Sr}_{0.9}\text{TiO}_3$  [140], Houzet *et al.* avec une stoechiométrie différente ( $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TiO}_3$ ) [141], une tangente de perte trop importante ( $\tan \delta > 0,1$ ), malgré une permittivité adéquate ( $\epsilon' > 100$ ). Des mesures sur des matériaux massifs, à 300K, pour du BT et du BST, ont été faites en 2009 et confirment cet effondrement de la permittivité vers 3 THz, ainsi que les pertes importantes associées, avec une tangente de perte parfois supérieures à 0.1 avant 0,3 THz [142]. Cet aperçu sur les matériaux à base BT laisse à penser que d'après nos critères, ces matériaux sont inutilisables dans la gamme térahertz. Il faut néanmoins remarquer que la permittivité de ces matériaux dépend fortement de leur stoechiométrie et de leur micro-structure. Parfois, des compositions similaires avec un léger dopage donnent des résultats complètement différents, comme le montre Jain *et al.* avec du  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TiO}_3$  dopé Mn dont la permittivité relative pouvait passer du simple au double, et la tangente de perte dépendait de la méthode de dopage utilisée [143]. Sans compter également leur forte sensibilité à la température, visible chez Teranishi *et al.* sur du  $\text{Ba}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{TiO}_3$  dont la permittivité relative à basse fréquence peut presque doubler en passant de 50°C à 25°C seulement [144].

Les travaux de Ostapchuk *et al.* en 2008 laissent à penser que ces matériaux pourraient fonctionner en entrée de gamme térahertz. S'intéressant à l'influence de la composition en Ba et Sr dans du BST (à 300K), il montre que pour des concentrations faibles en Baryum ( $x = 0,1$  et  $x = 0,2$  seulement), la permittivité est d'au minimum 350 (ce qui respecte notre première condition) et la tangente de perte associée reste inférieure à

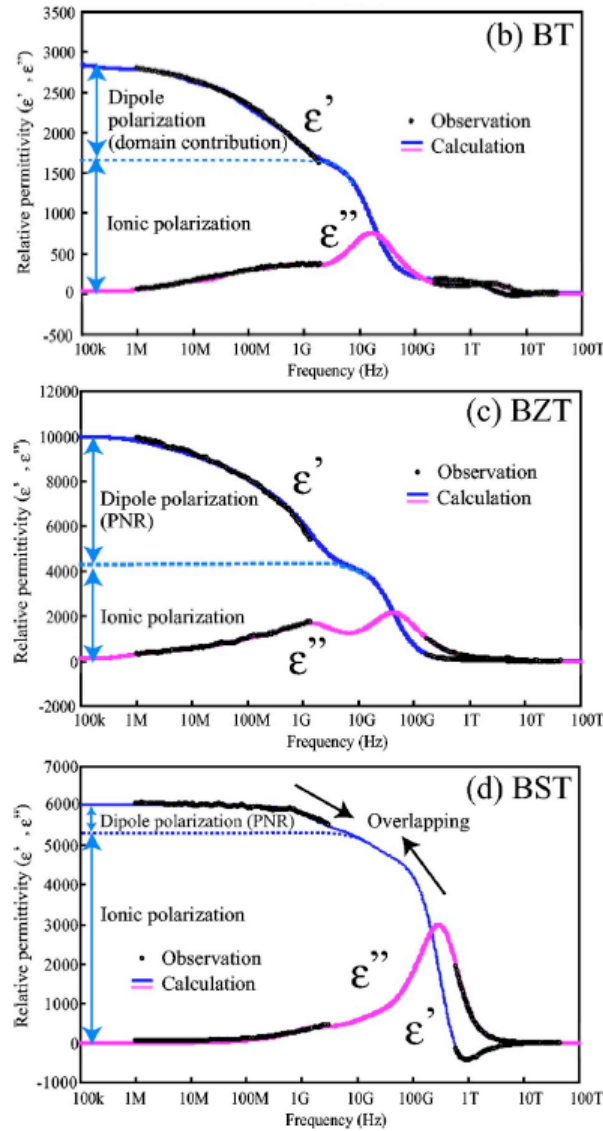


FIGURE III.3.10 – Mesure très large bande de la permittivité pour des poudres frittées à base BT. En haut le  $\text{BaTiO}_3$  classique, au centre du  $\text{Ba}(\text{Zr}_{0.25}\text{Ti}_{0.75})\text{O}_3$ , en bas du  $(\text{Ba}_{0.6}\text{Sr}_{0.4})\text{TiO}_3$ . Les points noirs correspondent aux mesures (spectromètre FIR au térahertz, analyseurs d'impédances à plus basse fréquence) les courbes bleue et violette sont des modèles théoriques : un modèle semi-quantique au térahertz et un modèle de polarisation dipolaire classique à plus basse fréquence. Ces mesures montrent l'effet important de la polarisation dipolaire (partie 2.1) à basse fréquence sur la permittivité relative de ces matériaux ( $\epsilon' \gg 100$ ). On observe un effondrement de la permittivité en entrée de gamme térahertz (entre 100 GHz et 1 THz) à cause de la disparition de la polarisation dipolaire. La polarisation ionique prend alors le dessus, le premier mode de phonon optique est particulièrement visible sur chaque graphe (partie imaginaire  $\epsilon''$  de forme lorentzienne). Ce premier phonon optique participe à l'augmentation des pertes au térahertz [122].



0,03 pour  $x = 0,1$ , et inférieure à 0,04 pour  $x = 0,2$ , dans une gamme de fréquence qui ne dépassent pas 0,3 THz [145]. On a donc des valeurs acceptables pour une utilisation au début de la gamme térahertz.

On se rend compte ainsi de l'importance de la stœchiométrie pour ces matériaux, si bien qu'on ne peut pas complètement exclure leur utilisation au térahertz. Néanmoins, sur les quelques matériaux présentés, les premiers phonons optiques sont souvent trop bas en fréquence et les pertes deviennent rapidement trop importantes au térahertz (supérieures à 0,03). Pour ces raisons, et malgré une utilisation possible, nous n'avons pas étudié plus en détail ce diélectrique.

### 3.4 Tantalate de Lithium ( $\text{LiTaO}_3$ )

Le  $\text{LiTaO}_3$  (LTO) semble être un très bon candidat pour une utilisation au térahertz puisque son premier phonon optique se situe relativement haut en fréquence, vers 4,25 THz [146], et qu'il a permis Wheeler *et al.* de montrer dès 2005, par simulation, une perméabilité *effective* négative vers 3,5 THz, comme on le voit sur les simulations de la figure III.3.11. Le métamatériau est dans ce cas composé d'un réseau de microsphères de LTO de 4  $\mu\text{m}$  de rayon [147].

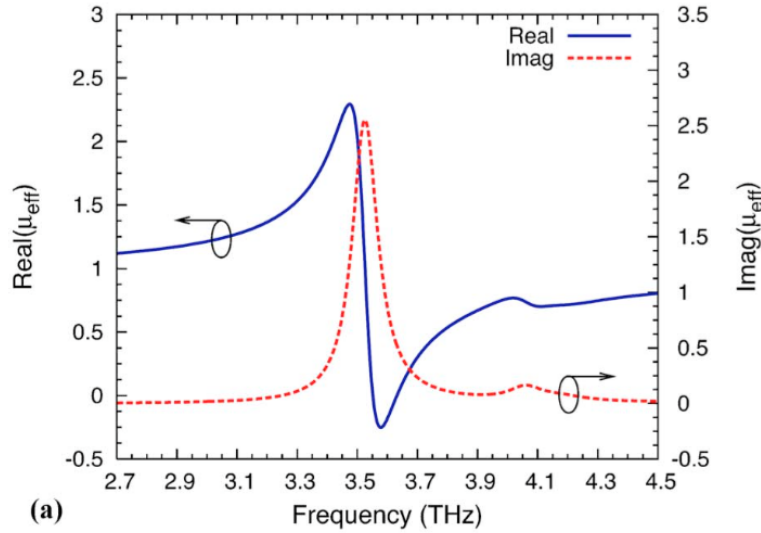


FIGURE III.3.11 – Perméabilité *effective* négative à 3,5 THz obtenue par simulation numérique grâce à un réseau de sphères de LTO de 4  $\mu\text{m}$  de rayon. Le facteur de remplissage est de 26,81 % [147].

Néanmoins, toujours selon nos critères précédents, ces pertes sont trop importantes au térahertz ( $\tan \delta > 0,03$ ), et sa permittivité relative  $\epsilon_r$  un peu faible ( $\epsilon_r \approx 50$ ) comme on le voit sur les mesures de la figure III.3.12, issue de la thèse de Sylvain Lannebère [120]. Cette faible permittivité était déjà mesurée en 1970 par Barker, il donne des valeurs d'environ 41 à 300 K, sans préciser cependant les pertes associées [146]. Cette faible permittivité relative, et des pertes visiblement importantes, limite son utilisation au térahertz. Nous n'avons donc pas retenu ce matériau pour nos simulations.

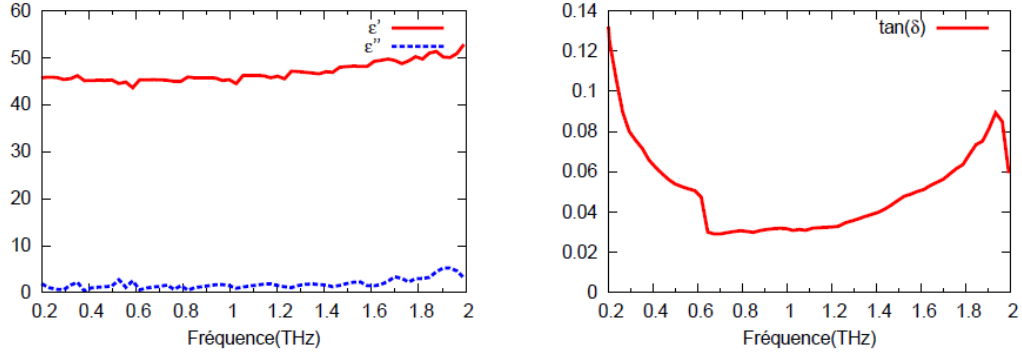


FIGURE III.3.12 – Permittivité et tangente de perte du LTO. Mesures faites au Laboratoire Ondes et Matière Aquitaine (LOMA) dans le cadre de la thèse de Sylvain Lannebère [120]. On voit que la permittivité relative est trop faible ( $\epsilon' \approx 45$ ) et les pertes trop importantes ( $\tan \delta > 0,03$ ) pour nos applications au térahertz [120].

### 3.5 Titanate de Magnésium ( $MgTiO_3$ )

Ce diélectrique, étudié notamment par Ferreira *et al.* dès 1993, a l'avantage de posséder des pertes relativement faibles à basse fréquence. En effet, comme on le voit sur la figure III.3.13, des mesures en transmission par FTIR (*Fourier Transform Infrared spectroscopy*), à 300 K, sur des échantillons ayant une épaisseur de 300  $\mu\text{m}$  montrent une tangente de perte inférieure à 0,03 jusqu'à 0,9 THz (30  $\text{cm}^{-1}$ ) [148]. Il possède en outre, toujours selon le même article, un premier phonon optique très haut en fréquence, à environ 8,5 THz (278  $\text{cm}^{-1}$ ).

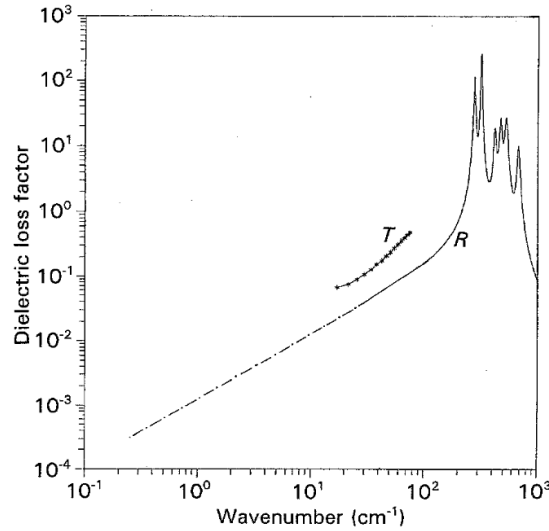


FIGURE III.3.13 – Tangente de perte du  $MgTiO_3$  en fonction de la fréquence, mesurée par transmission (T) et par réflexion (R) de 0,3 THz ( $10^1 \text{ cm}^{-1}$ ) à 30 THz ( $10^3 \text{ cm}^{-1}$ ). Les pointillés sont une extrapolation linéaire vers les basses fréquences. On voit que la tangente de perte ne dépasse pas 0,03 jusqu'à une fréquence d'environ 0,9 THz (30  $\text{cm}^{-1}$ ) et que les premiers phonons optiques sont haut en fréquence [148].

La limite de ce diélectrique est sa trop faible permittivité relative. On le voit sur la figure III.3.14, en dessous de la résonance des phonons optiques, la partie réelle de la permittivité ne dépasse pas 25, ce qui ne permettra pas un contraste d'indice suffisant pour nos dispositifs. Pour cette raison, nous ne l'avons pas utilisé dans nos simulations.

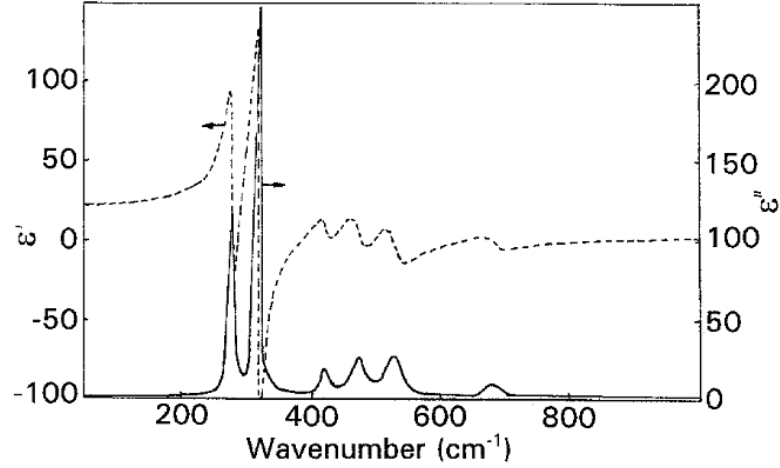


FIGURE III.3.14 – Permittivité relative  $\epsilon_r$  du  $\text{MgTiO}_3$  en fonction de la fréquence jusqu'à plus de 24 THz ( $800 \text{ cm}^{-1}$ ). On distingue nettement chaque phonon optique du cristal. Les pointillés correspondent à la partie réelle, le train plein à la partie imaginaire. On voit qu'en dessous de 6 THz ( $200 \text{ cm}^{-1}$ ), la partie réelle de la permittivité est inférieure à 25 [148].

### 3.6 Récapitulatif

L'ensemble des caractéristiques principales des diélectriques présenté ci-dessus est regroupé dans le tableau 5. Les valeurs de permittivité relative et de perte ont été prises vers 0,3 THz dans chaque cas, la position du premier phonon optique TO1 est exprimée en THz. Toutes ces valeurs sont valables à température ambiante ( $\approx 300\text{K}$ ).

Matériau	$\epsilon'_r$		$\tan \delta$		TO1 (THz)	
TiO <sub>2</sub>	100	✓	0,012	✓	5,6	✓
SrTiO <sub>3</sub>	300	✓	0,025	✓	2,8	✓
BaTiO <sub>3</sub>	460	✓	0,2	✗	3	✓
Ba <sub>0,1</sub> Sr <sub>0,9</sub> TiO <sub>3</sub>	380	✓	0,026	≈	3	✓
BaZr <sub>0,2</sub> Ti <sub>0,8</sub> O <sub>3</sub>	200	✓	0,6	✗	3,3	✓
LiTaO <sub>3</sub>	41	✗	0,08	✗	4,25	✓
MgTiO <sub>3</sub>	25	✗	0,01	✓	8,5	✓

TABLE 5 – Tableau récapitulatif des propriétés importantes des matériaux présentés dans ce chapitre. Les valeurs de  $\epsilon_r$  et de  $\tan \delta$  ont été prises à 0,3 THz. On remarque que le STO et le TiO<sub>2</sub> sont les diélectriques les plus adaptés à notre problème, puisqu'ils répondent chacun aux trois critères fixés en début de chapitre, c'est pourquoi nous les avons utilisés principalement au cours de cette thèse.

Ce tableau ne se veut pas exhaustif, il existe en effet un très grand nombre de céramiques à forte permittivité, souvent issues d'industries spécialisées [56], dont certaines auraient leur place dans ce tableau car respectant au moins un des critères fixés. Néanmoins, il était nécessaire de passer en revue les céramiques les plus utilisées dans le domaine, afin d'expliquer pourquoi nous avons préférentiellement orienté nos simulations vers le TiO<sub>2</sub> et le SrTiO<sub>3</sub>, les deux céramiques les plus à même de répondre à nos attentes.



## Chapitre IV

# Résultats numériques

## Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Point de départ aux micro-ondes</b>	<b>107</b>
<b>2</b>	<b>Métamatériaux tout-diélectrique au TéraHertz</b>	<b>108</b>
2.1	SrTiO <sub>3</sub> . . . . .	108
2.1.1	Premiers pas à partir des travaux de Nemec <i>et al.</i> . . . . .	109
2.1.2	Etudes paramétriques sur le pas . . . . .	113
2.1.3	Couplage fréquentiel . . . . .	115
2.1.4	Couplage spatial . . . . .	118
2.1.5	Rôle des pertes . . . . .	120
2.1.6	Travaux basés sur l'échantillon AQ100 . . . . .	122
2.1.7	Résonateurs rectangulaires de AQ100 . . . . .	127
2.1.8	Cellule à un résonateur bimodal . . . . .	134
2.2	TiO <sub>2</sub> . . . . .	135
2.2.1	Couplage spatial . . . . .	137
2.2.2	Couplage fréquentiel . . . . .	143
2.2.3	Indice négatif . . . . .	146
2.2.4	Métamatériau multicouche . . . . .	148
2.2.5	Structures 3D . . . . .	151
2.2.6	Effet du milieu hôte . . . . .	159
2.3	TEMEX Ceramics . . . . .	162
<b>3</b>	<b>Métamatériaux tout-diélectrique aux micro-ondes</b>	<b>164</b>
3.1	TiO <sub>2</sub> . . . . .	164
3.2	SrTiO <sub>3</sub> . . . . .	169
<b>4</b>	<b>Perspectives</b>	<b>173</b>
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>174</b>

---

Ce chapitre regroupe les résultats importants de simulations effectués au cours de cette thèse. Ceux-ci ont été effectués via le logiciel commercial HFSS décrit dans la partie 3.3 du chapitre II, les paramètres effectifs présentés sont tous extraits via la méthode décrite dans la partie 4 du chapitre II.

Nous commencerons par évoquer le point de départ de notre étude, à savoir les travaux de Thomas Lepetit qui portaient sur la réponse d'un Métamatériau tout-diélectrique (ADM) dont la cellule élémentaire consistait en un jeu de deux résonateurs cylindriques 2D à section carrée, couplés entre-eux et permettant un indice négatif vers 10 GHz [31, 59, 60]. Souhaitant exporter ce concept de fabrication au térahertz, la première partie de ce chapitre sera consacrée à nos résultats dans cette gamme de fréquence. En appliquant la méthode de couplage de Lepetit *at al.* vers 0,3 THz, nous décrirons de manière détaillée le comportement des deux matériaux les plus intéressants pour nos applications, abordés au chapitre III : le  $\text{TiO}_2$  et le  $\text{SrTiO}_3$ . La première partie de ce chapitre répondra aux questions suivantes : comment se comportent des résonateurs diélectriques basés sur ces matériaux au térahertz, comment obtenir un indice *effectif* négatif avec ceux-ci ? Est-ce toujours possible ? Quels sont les paramètres limitants ? Sera étudié notamment :

- La dimension des résonateurs
- La pas du réseau
- L'importance des pertes à ces fréquences
- La permittivité relative de la céramique
- L'influence du milieu hôte
- Le nombre de couches dans le sens de propagation de l'onde

Ces paramètres ont pour dénominateur commun le couplage inter-résonateur, dont l'importance semble primordiale dans les métamatériaux diélectriques. Nous distinguerons deux aspects, le couplage spatial et le couplage fréquentiel. Lorsqu'il est trop important, un nouveau régime de couplage apparaît et une « dégénérescence » de mode est observée entre les modes électrique et magnétique de nos structures, nous essaierons de comprendre pourquoi ce phénomène s'observe et nous essaierons de le caractériser.

Une seconde partie, plus succincte que la première mais néanmoins importante, fera un retour aux fréquences micro-ondes avec les mêmes diélectriques, afin de vérifier si les phénomènes de couplage et de dégénérescence mis en évidence au térahertz s'observent également, et si oui, de quelle manière. Nous terminerons enfin par les perspectives que les résultats de cette thèse laissent entrevoir, notamment la simplification de la cellule élémentaire à l'aide de résonateurs rectangulaires bimodaux.

## 1 Point de départ aux micro-ondes

Partant des travaux de Thomas Lepetit montrant la faisabilité d'un indice *effectif* négatif aux fréquences micro-ondes avec un métamatériau tout-diélectrique de  $\text{BaSrTiO}_3$  [31], nous nous sommes intéressés à essayer de reproduire ces résultats dans la gamme de fréquence térahertz. La cellule élémentaire de son ADM consistait en un jeu de deux résonateurs cylindriques 2D de section carrée, couplés entre eux et liés par une base en PVC, permettant un indice négatif vers 10 GHz [31,60], une représentation schématique de cette cellule ainsi qu'une photo du dispositif est visible sur la figure IV.1.1.

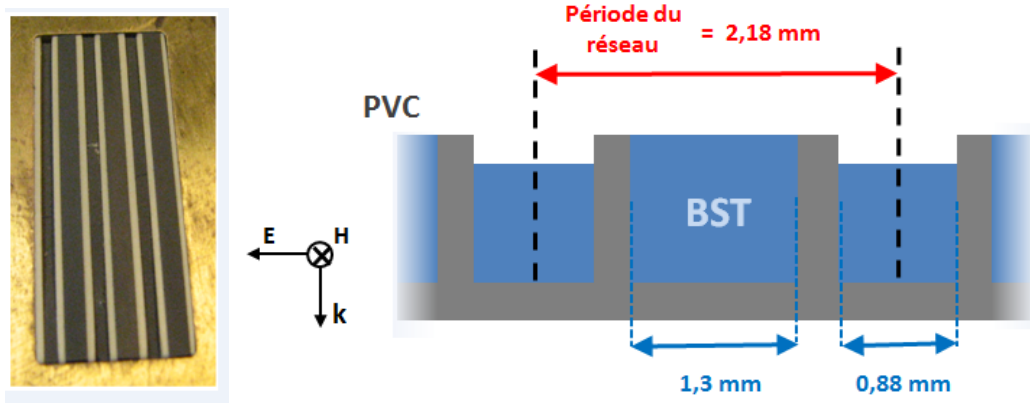


FIGURE IV.1.1 – Photographie (gauche) et représentation schématique (droite) du dispositif de Lepetit *et al.* leur permettant d'obtenir un indice négatif vers 10 GHz. L'ADM est composé de tiges de  $\text{BaSrTiO}_3$  ( $\epsilon_r = 575$ ,  $\tan \delta = 0,006$ ) dans un milieu hôte en PVC [31].

Le métamatériau ainsi fabriqué permet d'obtenir un indice négatif, on le voit sur la figure IV.1.2. La superposition en fréquence d'une résonance de Mie magnétique  $\text{TE}_{11}$ , vers 10 GHz, et d'une résonance de Mie électrique  $\text{TE}_{12}$ , vers 10,6 GHz, permettent respectivement d'avoir une perméabilité *effective* négative et une permittivité *effective* négative dans la même gamme de fréquence. La superposition de ces deux zones permet l'apparition d'un indice *effectif* négatif [31]. Cette méthode de superposition des modes de résonance de Mie de nature différente à l'aide d'un jeu de deux résonateurs différents fut notre point de départ dans la conception de dispositifs au térahertz.



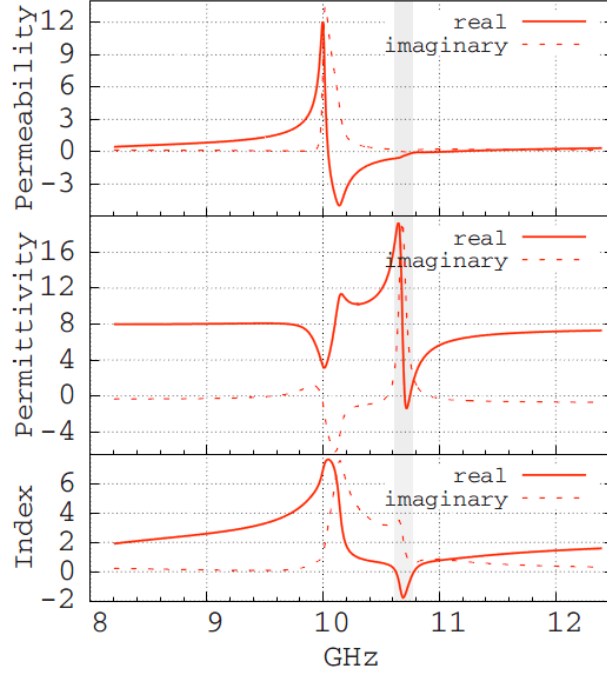


FIGURE IV.1.2 – Permittivité, perméabilité et indice effectifs d'un ADM de Lepetit *et al.* [31] dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres de BST ( $\epsilon_r = 575$ ,  $\tan \delta = 0,006$ ) de section carrée de côté  $0,88 \mu\text{m}$  et  $1,3 \mu\text{m}$  dans une matrice en PVC ( $\epsilon_r = 2,85$ ). Le premier mode magnétique  $\text{TE}_{11}$  est à 10 GHz, le second mode électrique  $\text{TE}_{12}$  est à 10,6 GHz, la combinaison des deux permet d'observer un indice *effectif* négatif dont le minimum de la partie réelle  $\text{Re}(N_{\text{eff}})$  vaut environ -2 vers 10,6 GHz. La zone grisée correspond à la zone d'indice négatif, respectant la condition de Depine *et al.* [149].

## 2 Métamatériaux tout-diélectrique au Téraherzt

Cette section regroupe les résultats de simulation faits au térahertz dans le cadre de cette thèse. Le STO a été le premier diélectrique étudié, suite aux travaux de Nemec *et al.* [33] en entrée de gamme térahertz. Ce matériau a cependant montré ses limites, nous verrons précisément quelles en sont les raisons. C'est pourquoi, nous présenterons dans une seconde partie, les résultats de simulations sur le  $\text{TiO}_2$ , plus intéressants pour nos applications, les phénomènes observés étant plus marqués.

### 2.1 $\text{SrTiO}_3$

Comme nous l'avons vu au chapitre III, partie 3.2, le  $\text{SrTiO}_3$  est un matériau dont l'utilisation est abondante. C'est un matériau dont la permittivité relative  $\epsilon_r$  et les pertes associées sont bien connues et ceci va nous permettre de réaliser nos premières simulations avec des valeurs relativement proches de la réalité.

Néanmoins, nous le verrons en détail dans la sous-partie 2.1.6, les premières mesures par le LPA sur des échantillons fabriqués dans le cadre de cette thèse (partie 3.2.1) nous

ont obligées à revoir légèrement nos premières simulations et à concevoir des dispositifs à la géométrie légèrement différente. Ceci nous a permis, progressivement, d'aller vers des métamatériaux plus simples à fabriquer, avec finalement une cellule élémentaire à un seul résonateur, bimodal, décrit dans la partie 2.1.8.

### 2.1.1 Premiers pas à partir des travaux de Nemec *et al.*

Les dispositifs de Nemec *et al.* nous ont fortement inspirés pour l'utilisation de  $\text{SrTiO}_3$  dans nos dispositifs au térahertz [33]. En effet, comme présenté sur la figure III.3.7, les résonances de Mie au sein de structures micrométriques de STO permettent une perméabilité *effective* négative, et peut-être, bien que ce ne soit pas le cas dans l'article en question, une permittivité *effective* négative. C'est ce que nous avons d'abord cherché à mettre en évidence, toujours dans l'idée de concevoir des dispositifs proches de ceux de Lepetit *et al.* sur la figure IV.1.1.

En utilisant l'équation (II.2.18), on peut se faire une idée de la dimension à choisir pour concevoir des résonateurs cylindriques 2D de section carrée fonctionnant dans la gamme térahertz. Si l'on cherche à rester avec le même écart relatif que la figure IV.1.2, avec un écart inter-mode  $\Delta f / f = 6\%$  entre la résonance électrique (10,6 GHz) et la résonance magnétique (10 GHz), alors on trouve que pour un résonateur de  $35 \mu\text{m}$  de côté :

- $\text{TE}_{11} = 349 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{12} = 372 \text{ GHz}$

La même formule nous donne, pour un résonateur de  $52 \mu\text{m}$  de côté :

- $\text{TE}_{11} = 236 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{12} = 372 \text{ GHz}$

Ainsi, la résonance magnétique du cylindre de côté  $a_m = 35 \mu\text{m}$ <sup>9</sup> se situe à 349 GHz et la résonance électrique du cylindre de côté  $a_e = 52 \mu\text{m}$  se situe à 372 GHz, soit un écart relatif  $\Delta f / f$  entre les deux résonances de 6% également. Ces deux dimensions nous permettent donc de travailler en entrée de gamme térahertz avec du STO.

Voyons maintenant si un indice négatif est possible avec un ADM dont la cellule élémentaire est composée de ces deux résonateurs seulement, avec l'air pour milieu hôte. Une représentation schématique de cette cellule est visible sur la figure IV.2.1. Les résonateurs sont alignés par rapport à leur centre, ce sont des tiges de section carrée, considérées comme infinies dans la direction **H**, la périodicité se fait selon la direction **E**. Pour que l'écart entre les résonateurs soit à peu près le même que sur la figure IV.1.1, nous prenons un pas entre les plus proches résonateurs de  $60 \mu\text{m}$ . Nous distinguons le pas entre résonateurs de même type,  $p_1$ , du pas entre résonateurs différents,  $p_2$ .

---

9. Par commodité, nous désignerons dans ce chapitre le côté du résonateur magnétique par  $a_m$  et le côté du résonateur électrique par  $a_e$

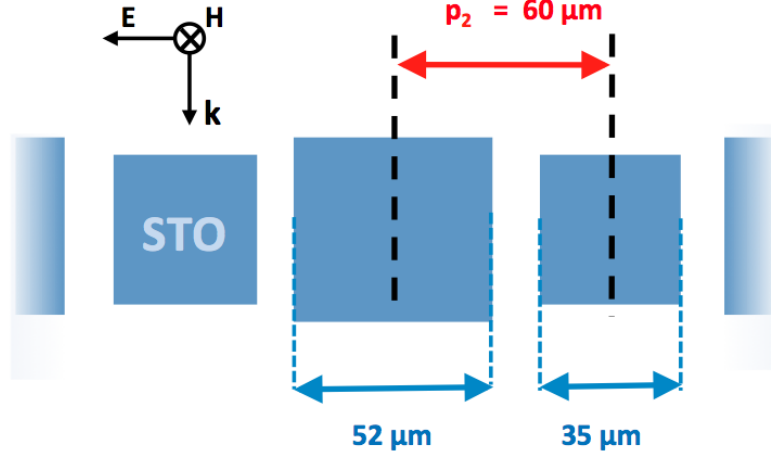


FIGURE IV.2.1 – Représentation schématique de la cellule élémentaire d'un dispositif de  $\text{SrTiO}_3$  ( $\epsilon_r = 300$ ,  $\tan \delta = 0,025$ ) au térahertz. L'ADM est composé de tiges diélectriques à section carrée, avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 52 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 60 \mu\text{m}$ . Les tiges sont considérées comme infinies dans la direction  $\mathbf{H}$ , la périodicité se fait selon la direction  $\mathbf{E}$ . l'air sert de milieu hôte.

Commençons par regarder le comportement de chaque sous-réseau indépendamment à l'aide de HFSS, comme illustré sur la figure IV.2.2. Chacun de ces schémas représente la boîte de simulation du logiciel, elle correspond à la cellule élémentaire de notre métamatériau. Comme nous travaillons avec des tiges 2D, la boîte de simulation est une coupe perpendiculaire à l'axe des tiges, dont la hauteur n'a pas forcément d'importance, puisque les tiges sont considérées comme infinies dans cette direction. L'onde incidente se propage entre les deux conditions d'excitations « waveport » (en orange), c'est donc la direction  $\mathbf{k}$ . Les conditions aux limites PEC (rouges) et PMC (bleues) explicitées à la partie 3.3.2 du chapitre II permettent de multiplier périodiquement la cellule élémentaire et fixer la polarisation incidente, qui est ici transverse électrique (TE), c'est-à-dire que le champ  $\mathbf{E}$  est perpendiculaire à l'axe des tiges. Les conditions PEC reproduisent la cellule élémentaire à l'infini dans la direction  $\mathbf{E}$ , les conditions PMC reproduisent la cellule à l'infini dans la direction  $\mathbf{H}$ . En réalité, sur cette figure, chaque schéma correspond à *trois fois* la cellule élémentaire, la section des tiges centrales est en effet maintenue entière afin de visualiser totalement les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  dans une section de tige. En revanche, les sections des tiges en contact avec les bords PEC doivent être coupées en leur milieu afin de reproduire la cellule par symétrie plane.

Le schéma du haut de la figure IV.2.2 correspond à la boîte de simulation HFSS pour l'étude du sous-réseau de résonateurs magnétiques, en vert. Au centre, le schéma pour l'étude du sous-réseau de résonateurs électriques, en bleu. En bas, le schéma correspond à la réunion des deux sous-réseaux. Séparer chaque sous-réseau permet de vérifier si la résonance de Mie associée à chacun permet d'avoir une permittivité *effective* négative dans un cas, une perméabilité *effective* négative dans l'autre cas, et enfin un indice *effectif* négatif si l'on regroupe les deux [31].

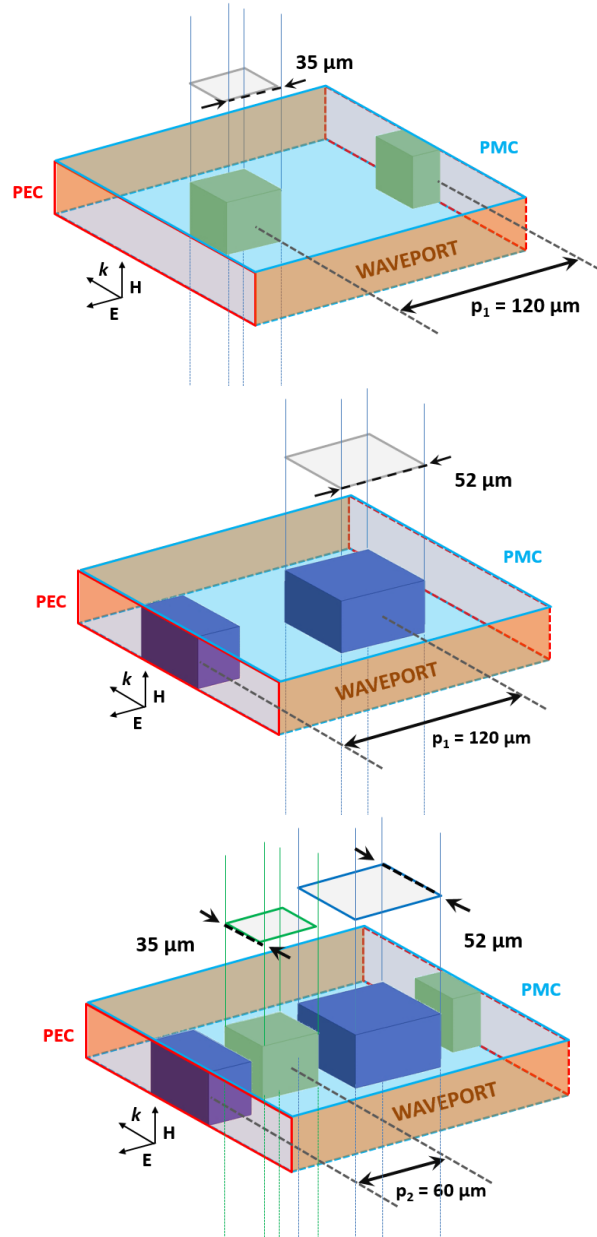


FIGURE IV.2.2 – Cellules élémentaires HFSS de deux sous-réseaux et leur regroupement. Ces cellules permettent de simuler le comportement d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée de cylindres 2D à section carrée de STO dans de l'air. En vert le résonateur magnétique ( $a_m = 35 \mu\text{m}$ ), en bleu le résonateur électrique ( $a_e = 52 \mu\text{m}$ ). Le pas des deux sous-réseaux est  $p_1 = 120 \mu\text{m}$ , la cellule du bas est le regroupement des deux sous-réseaux précédents, avec un pas  $p_2 = 60 \mu\text{m}$  entre les résonateurs les plus proches. Les conditions PEC, PMC et *waveport* sont telles que décrites à la partie 2.1 du chapitre II, nous serons toujours en polarisation TE dans nos simulations, comme indiqué par le trièdre  $(\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{H})$ . Le but des simulations est de mettre en évidence un indice *effectif* négatif au térahertz.

La figure IV.2.3 montre la perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$  et la permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est un cylindre 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 52 \mu\text{m}$ , comme schématisé sur les deux premières cellules élémentaires de la figure IV.2.2. Nemec *et al.* montrait déjà auparavant avec du STO dans la même gamme, nous avons bien  $\mu'_{eff} < 0$ , en revanche,  $\epsilon'_{eff} > 0$ , ce qui est problématique.

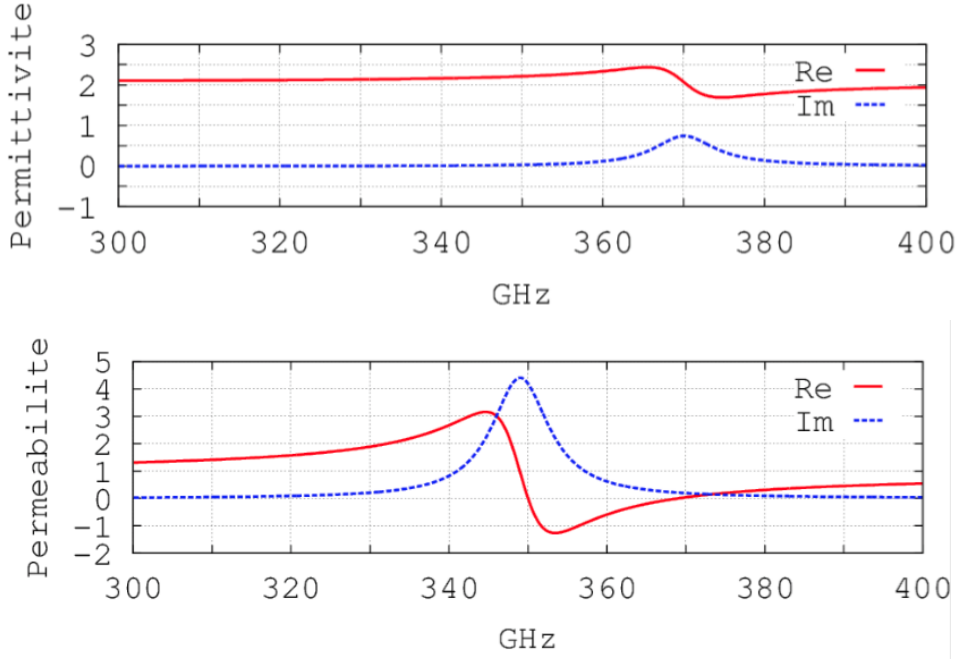


FIGURE IV.2.3 – Permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$  des deux sous-réseaux de STO précédents. En haut,  $\epsilon_{eff}$  avec  $a_e = 52 \mu\text{m}$  et  $p_1 = 120 \mu\text{m}$ . En bas  $\mu_{eff}$  avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $p_1 = 120 \mu\text{m}$ . On observe seulement une perméabilité *effective* négative entre 350 et 360 GHz, la permittivité *effective* reste strictement positive sur toute la gamme, ce qui pose problème pour nos applications.

En effet, lorsque l'on regroupe les deux sous-réseaux (cellule élémentaire du bas sur la figure IV.2.2), aucun indice *effectif* négatif apparaît, comme on peut le vérifier sur la figure IV.2.4. Dans les conditions strictes que Thomas Lepetit proposait en 2009 [31], il n'est pas possible d'obtenir un indice négatif avec du STO. Il devient alors nécessaire de changer certains paramètres géométriques de nos structures afin de calibrer au mieux le dispositif pour, peut-être, faire apparaître un indice *effectif* négatif. Nous commencerons par le plus simple d'entre eux, à savoir le pas du réseau, avant de suivre la liste présentée en introduction.

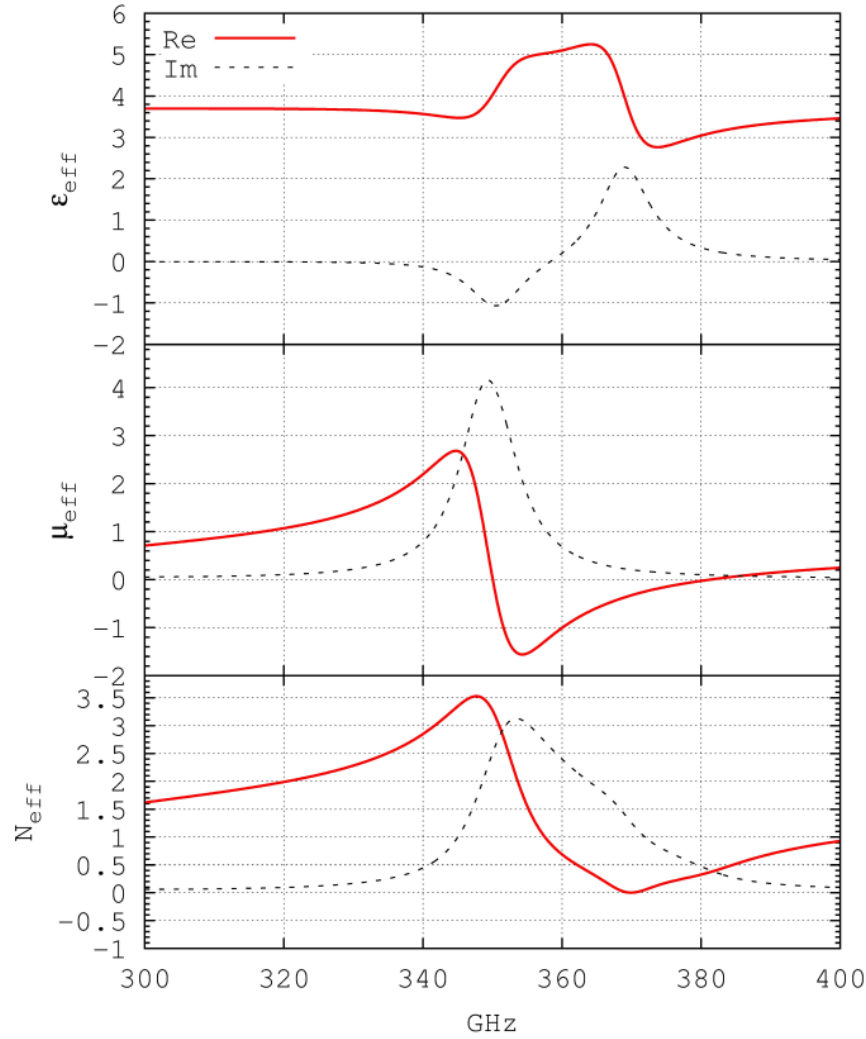


FIGURE IV.2.4 – Paramètres effectifs pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO ( $\epsilon_r = 300$ ,  $\tan \delta = 0,025$ ) à section carrée avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 52 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 60 \mu\text{m}$ , avec un écart relatif en fréquence de 6% entre les modes. Comme on pouvait s’y attendre à la vue de la figure IV.2.3 où la permittivité *effective* n’était pas négative, un indice *effectif* négatif n’est pas possible dans ces conditions.

### 2.1.2 Etudes paramétriques sur le pas

On constate pour commencer que nos structures diélectriques sont fortement sensibles au couplage inter-résonateur. En effet, si l’on se place dans les mêmes conditions que la figure IV.2.3 mais avec un pas  $p_1$  diminué de moitié, soit  $p_1 = 60 \mu\text{m}$ , les résonances de Mie, électrique comme magnétique, sont sensiblement différentes, comme on le voit sur la figure IV.2.5. On ne peut donc pas raisonner en terme de « sous-réseau » avec ce type de structure : la réponse du réseau final n’est pas simplement la somme des réponses de deux sous-réseaux, comme le laissait penser la succession des schémas de la figure IV.2.2.

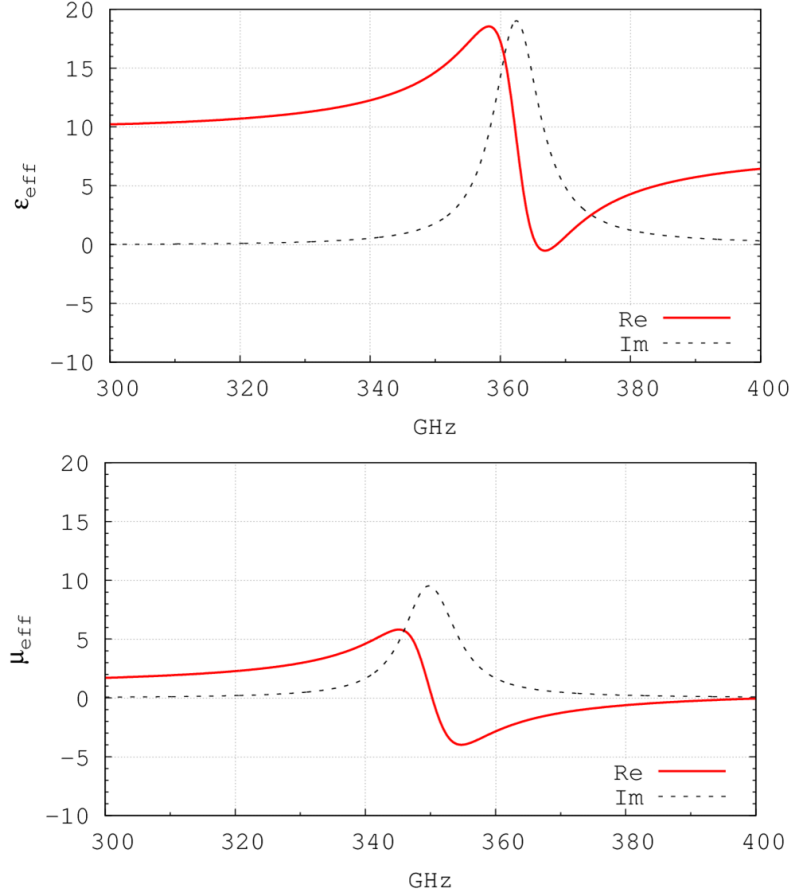


FIGURE IV.2.5 – Permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$  des deux sous-réseaux de STO précédents, le pas  $p_1$  est diminué de moitié par rapport à la figure IV.2.3. En haut,  $\epsilon_{eff}$  avec  $a_e = 52 \mu m$  et  $p_1 = 60 \mu m$ . En bas  $\mu_{eff}$  avec  $a_m = 35 \mu m$  et  $p_1 = 60 \mu m$ . Les résonances sont ainsi beaucoup plus marquées : on observe une partie réelle légèrement négative dans le premier cas, et clairement négative dans le second cas, ce qui n'est pas du tout possible avec un pas  $p_1 = 120 \mu m$ . La forte sensibilité au couplage de nos structure est avérée.

Cette sensibilité se confirme s'il l'on diminue progressivement le pas du réseau. On le voit sur la figure IV.2.6 : passant d'un pas  $p_2$  de  $70 \mu m$  à  $55 \mu m$ , on voit apparaître un indice *effectif* négatif vers 369 GHz pour un pas  $p_2 = 55 \mu m$ . Il est donc possible d'obtenir un indice négatif avec du STO, mais il semble nécessaire de beaucoup jouer sur le pas du réseau pour cela. Ce type de couplage sera désigné par le terme de « couplage spatial » dans la suite de cette thèse. Nous allons étudier plus en détail ce phénomène dans la partie 2.1.4 suivante.

La méthode consistant à jouer sur la section d'un des résonateurs diélectriques dans le but de déplacer ses fréquences de résonance, comme peut le prédire l'équation (II.2.18) sera désigné par le terme de « couplage fréquentiel » dans la suite de cette thèse. Nous allons voir en quoi ce couplage consiste et quels en sont les effets.

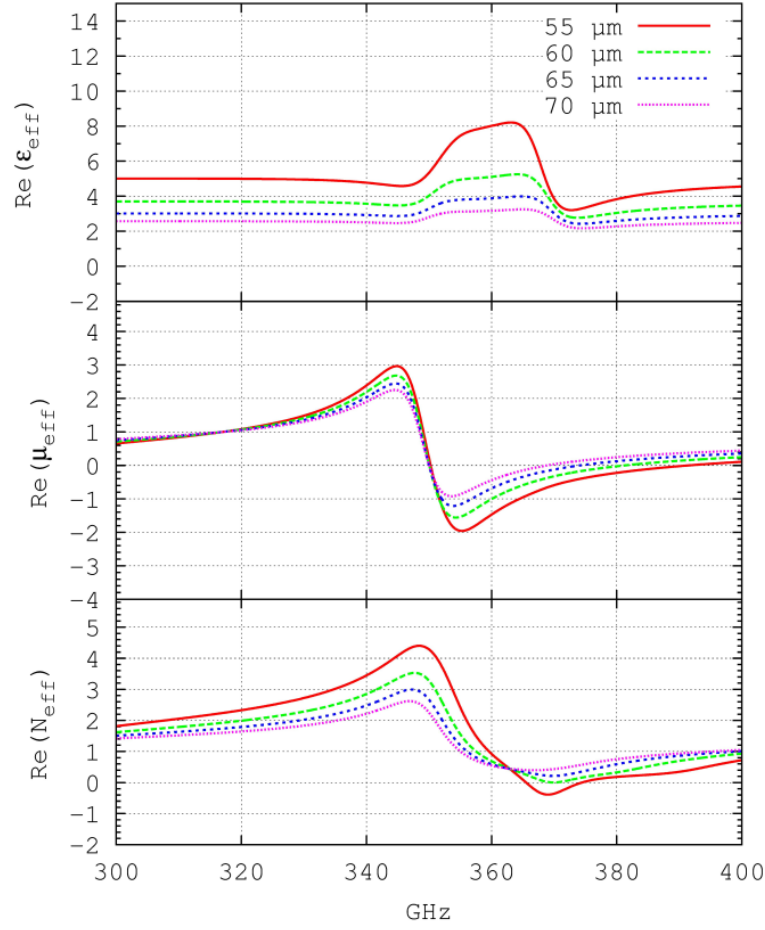


FIGURE IV.2.6 – Paramètres effectifs (parties réelles) en fonction du pas  $p_2$  du réseau. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu m$  et  $a_e = 52 \mu m$ . On voit que plus le pas du réseau est faible, plus les résonances sont creusées, jusqu'à faire apparaître un indice négatif pour un pas  $p_2 = 55 \mu m$  à 369 GHz.

### 2.1.3 Couplage fréquentiel

Dans le but d'améliorer la zone d'indice *effectif* négatif au térahertz mise en évidence sur la figure IV.2.6, on peut jouer sur un autre paramètre qu'est la section des résonateurs cylindriques. Celle-ci détermine en effet la position en fréquence des résonances de Mie, comme le montrait déjà l'équation (II.2.18) pour des résonateurs parallélépipédiques isolés. Ce déplacement en fréquence induit un couplage « fréquentiel » entre les résonances. On se rend compte du rôle important de ce déplacement en partant des résultats de la figure IV.2.6. Celle-ci montre un ADM dont la cellule élémentaire est composé de deux résonateurs de côtés  $a_m = 35 \mu m$  et  $a_e = 52 \mu m$ . D'après l'équation (II.2.18), pour un résonateur à section carrée de  $54 \mu m$  de côté, les fréquences de résonances sont :

- $TE_{11} = 226 \text{ GHz}$
- $TE_{12} = 358 \text{ GHz}$



Ainsi, pour un ADM dont la cellule élémentaire est cette fois-ci  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 54 \mu\text{m}$ , on abaisse légèrement en fréquence la résonance électrique  $\text{TE}_{12}$ . L'effet de ce changement est particulièrement visible si l'on reproduit la même étude paramétrique que sur la figure IV.2.6. On obtient les paramètres effectifs de la figure IV.2.7. La zone d'indice *effectif* négatif pour un pas de  $55 \mu\text{m}$  se retrouve plus creusée que précédemment.

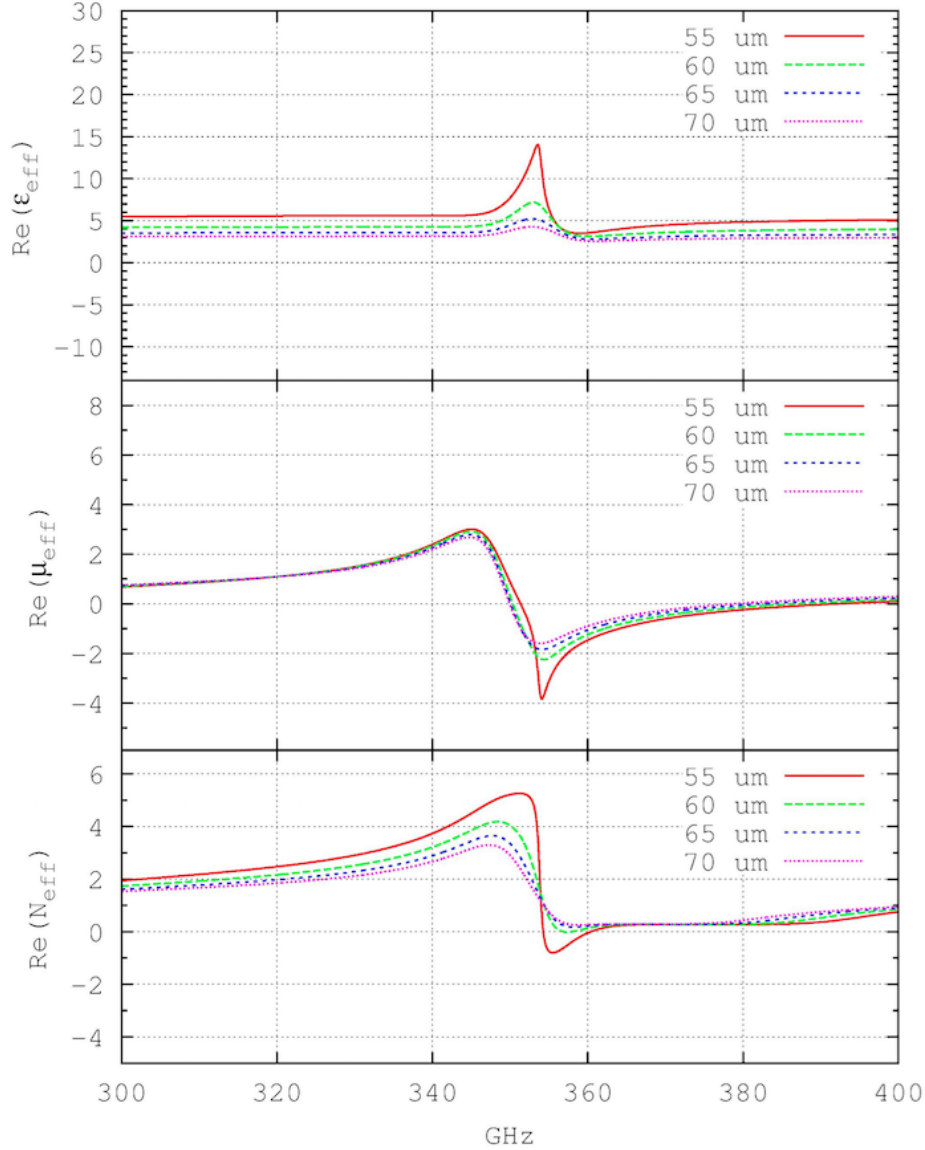


FIGURE IV.2.7 – Paramètres effectifs (parties réelles) en fonction du pas  $p_2$  du réseau. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 54 \mu\text{m}$ . On voit que la zone d'indice *effectif* négatif est plus profonde et plus large que pour la figure IV.2.6. Elle est également plus basse en fréquence puisqu'elle « suit » le décalage en fréquence du mode électrique  $\text{TE}_{12}$ .

Passer de  $a_e = 52 \mu m$  à  $a_e = 54 \mu m$  permet de décaler le minimum d'indice *effectif* négatif de 369 GHz à 357 GHz. Cet effet est visible sur la figure IV.2.8, où l'on voit une diminution progressive du minimum d'indice *effectif* lorsque  $a_e$  augmente, jusqu'à atteindre une valeur  $N_{eff} = -0,7$ . Cette limite est atteinte pour  $a_e = 54 \mu m$ , au-delà, l'indice négatif ne peut plus être extrait de manière continue. Cette sensibilité sur les dimensions géométriques rend délicate l'obtention d'un indice négatif.

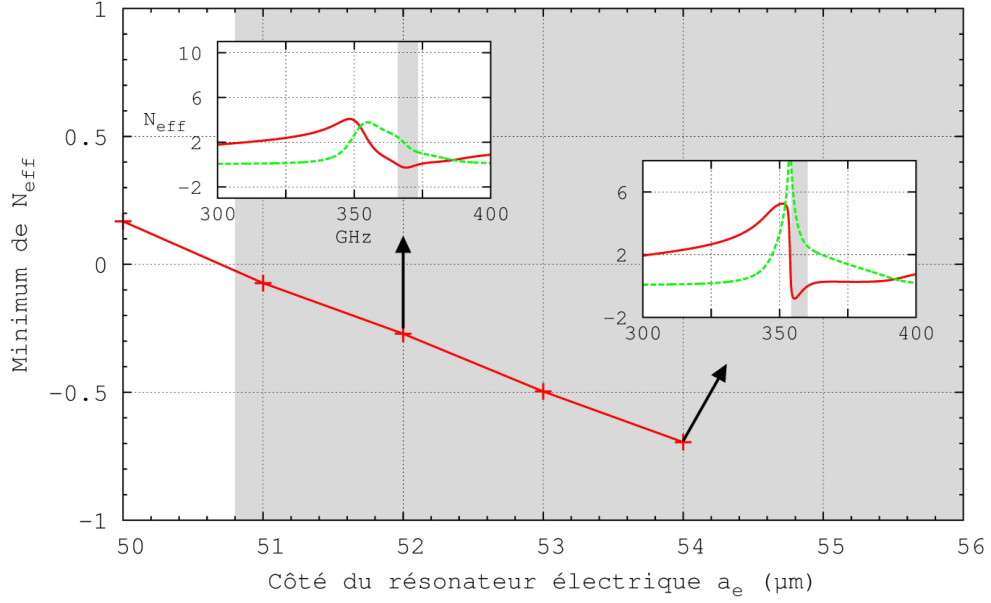


FIGURE IV.2.8 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du côté  $a_e$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu m$  et  $p_2 = 55 \mu m$ . En insertion, la partie réelle (rouge) et imaginaire (verte) de l'indice *effectif* pour  $a_e = 52$  et  $54 \mu m$ . On voit que le minimum de l'indice *effectif* est peu négatif, et sur une courte gamme de fréquence.

### 2.1.4 Couplage spatial

Revenons plus en détail sur l'effet du pas du réseau. Nous venons de voir sur la figure IV.2.6 que le couplage spatial a un effet important sur l'apparition d'un indice *effectif* négatif. C'est encore plus évident si l'on ne regarde que le minimum d'indice, comme sur la figure IV.2.9. Dans les conditions d'une cellule élémentaire où  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 54 \mu\text{m}$ , comme sur la figure IV.2.7, le minimum d'indice décroît nettement en fonction du pas, jusqu'à atteindre une « limite » (on entre dans la bande de résonance décrite dans la partie 4.5 du chapitre II) qui, au-delà, fait perdre son sens aux paramètres effectifs calculés. C'est pourquoi nous n'allons pas au-delà d'un pas de  $55 \mu\text{m}$ .

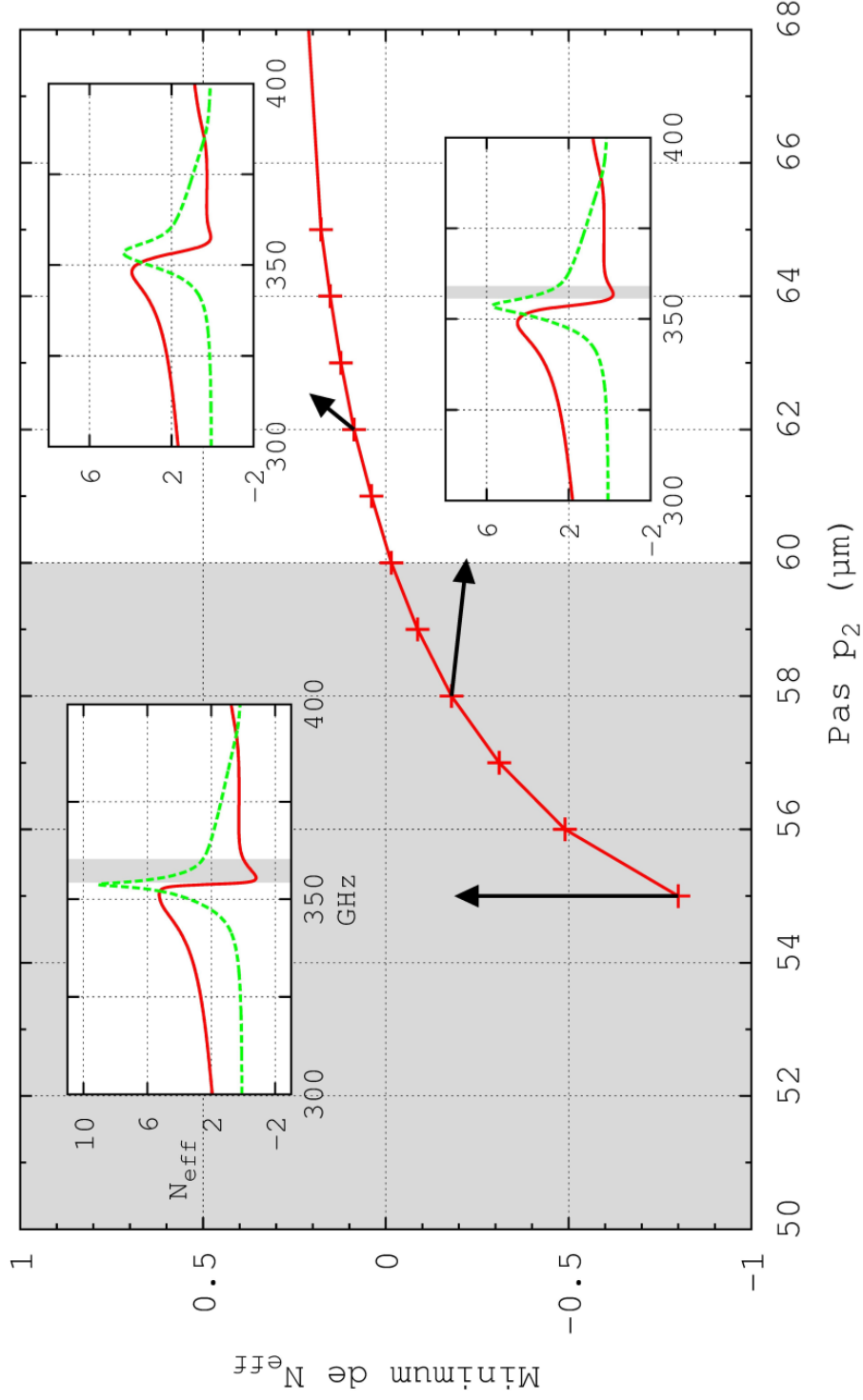


FIGURE IV.2.9 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 54 \mu\text{m}$ . En insertion, la partie réelle (rouge) et imaginaire (verte) de l'indice *effectif* pour  $p_2 = 55, 57$  et  $60 \mu\text{m}$ . On voit que le minimum de l'indice *effectif* diminue nettement avec le pas du réseau.

### 2.1.5 Rôle des pertes

Bien qu'un réglage fin des paramètres géométriques de nos résonateurs le permettent, il reste difficile d'obtenir un indice *effectif*  $N_{eff}$  négatif avec du STO. On le voit sur la figure IV.2.9, ce dernier ne dépasse pas  $N_{eff} = -0,8$  ce qui est une valeur faible de l'indice en valeur absolue. De plus, cet indice négatif est obtenu alors même que la partie réelle de la permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  est strictement positive, comme on le voit sur la figure IV.2.7. C'est donc un indice négatif principalement lié aux parties imaginaires des paramètres effectifs et à la très faible perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$ , qui certes permet de respecter la condition de Depine *et al.* [149], mais entraîne une impédance *effective*  $Z_{eff}$  trop éloignée de l'unité<sup>10</sup> et ne respecte pas l'interprétation que nous donnions de l'indice négatif à la partie 1.2.1, supposant  $\epsilon'_{eff} < 0$  et  $\mu'_{eff} < 0$ .

A titre indicatif, la figure IV.2.10 montre l'effet de la diminution de la tangente de perte du STO sur les paramètres effectifs. En se plaçant dans les conditions de la figure IV.2.6, c'est-à-dire avec un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu\text{m}$  et  $a_e = 52 \mu\text{m}$  et un pas  $p_2 = 60 \mu\text{m}$ . On remarque que pour  $\tan \delta = 0,005$  les résonances sont plus marquées, un indice *effectif* négatif apparaît et dépasse même  $N_{eff} = -1$  alors qu'il reste strictement positif tant que  $\tan \delta > 0,015$ .

---

10. Pour rappel, l'impédance est reliée à la permittivité et la perméabilité par la relation :  $Z = \sqrt{\mu/\epsilon}$

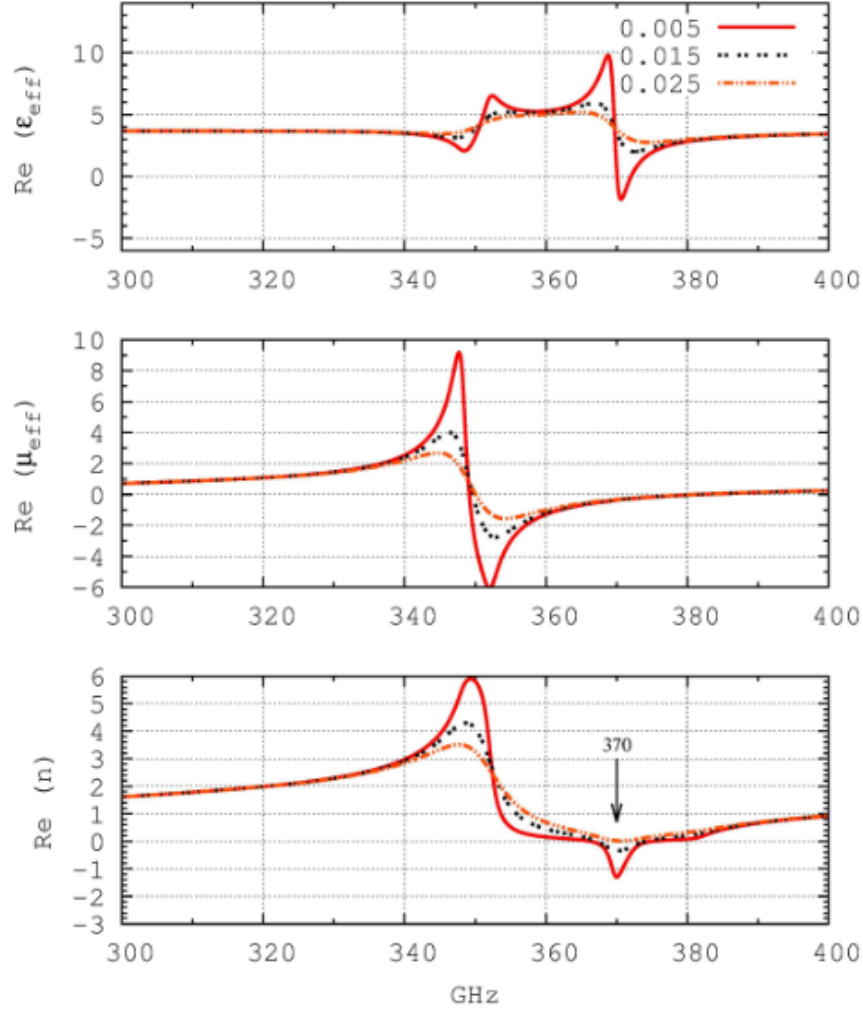


FIGURE IV.2.10 – Paramètres effectifs (parties réelles) **lorsque les pertes du STO varient**. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO à section carrée avec  $a_m = 35 \mu m$ ,  $a_e = 52 \mu m$  et  $p_2 = 60 \mu m$ . On remarque que pour  $\tan \delta = 0,005$  les résonances sont nettement plus marquées, un indice *effectif* négatif apparaît et dépasse  $N_{eff} = -1$  alors qu’il reste strictement positif tant que  $\tan \delta > 0,015$ .

Finalement, bien qu’un indice *effectif* négatif soit faisable dans la gamme térahertz à partir du STO, il se retrouve limité par une sensibilité géométrique contraignante, sur le pas comme sur la section des résonateurs. Les pertes diélectriques, bien qu’inférieures à la limite fixée au chapitre III, sont importantes et tout aussi contraignantes, la figure IV.2.10 l’illustre bien. C’est la raison pour laquelle nous nous sommes tourné vers le  $TiO_2$  au cours de cette thèse, dont la tangente de perte de 0,01 en entrée de gamme térahertz se révélera moins contraignante pour nos applications.

Malgré tout, des échantillons de STO ont été fabriqués dans le cadre du projet *TéraMetaDiel*. Ces échantillons ont été caractérisés par spectroscopie THz et ont montré des valeurs différentes de permittivité relative  $\epsilon_r$ . Avant de passer aux résultats de simu-

lation sur le  $\text{TiO}_2$ , nous allons donc voir les simulations effectuées suite à ces nouvelles mesures, en prenant un échantillon en particulier, le cas le plus intéressant, désigné par le terme AQ 100 dans la partie suivante.

### 2.1.6 Travaux basés sur l'échantillon AQ100

Les mesures de permittivité relative  $\epsilon_r$  par le LPA sur le STO « AQ 100 » sont visibles dans la partie 3.2.1 du chapitre III. Nous avons choisi cet échantillon en particulier car il présente les pertes les plus faibles vers 0,3 THz, avec une tangente de perte de 0,03 soit la limite que nous nous sommes fixé au chapitre III. Cette étude est nécessaire pour une réalisation pratique de résonateurs diélectriques basés sur ce STO en particulier.

A cause des pertes plus importantes que celles données par Nemec *et al.* [33], un indice *effectif* négatif est encore plus difficile à obtenir. En étudiant le couplage spatial à la manière de la partie 2.1.4, et en le combinant avec un couplage fréquentiel (partie 2.1.3), on voit sur la figure IV.2.11 que l'indice *effectif* devient négatif pour un pas  $p_2 = 54 \mu\text{m}$  seulement, ce quel que soit le côté du résonateur magnétique  $a_m$ . Le couplage fréquentiel n'a un effet que pour un pas  $p_2 < 52 \mu\text{m}$ . Avec un tel pas du réseau, et dans le meilleur des cas où  $a_e = 54 \mu\text{m}$  et  $a_m = 41 \mu\text{m}$ , l'écart entre deux résonateurs n'est seulement que de  $4,5 \mu\text{m}$  ce qui rend la fabrication particulièrement difficile. Cette faible tolérance sur les dimensions a été un des éléments nous ayant poussé à simplifier nos cellules élémentaires, pour arriver petit à petit aux résonateurs bimodaux de la partie 2.1.8.

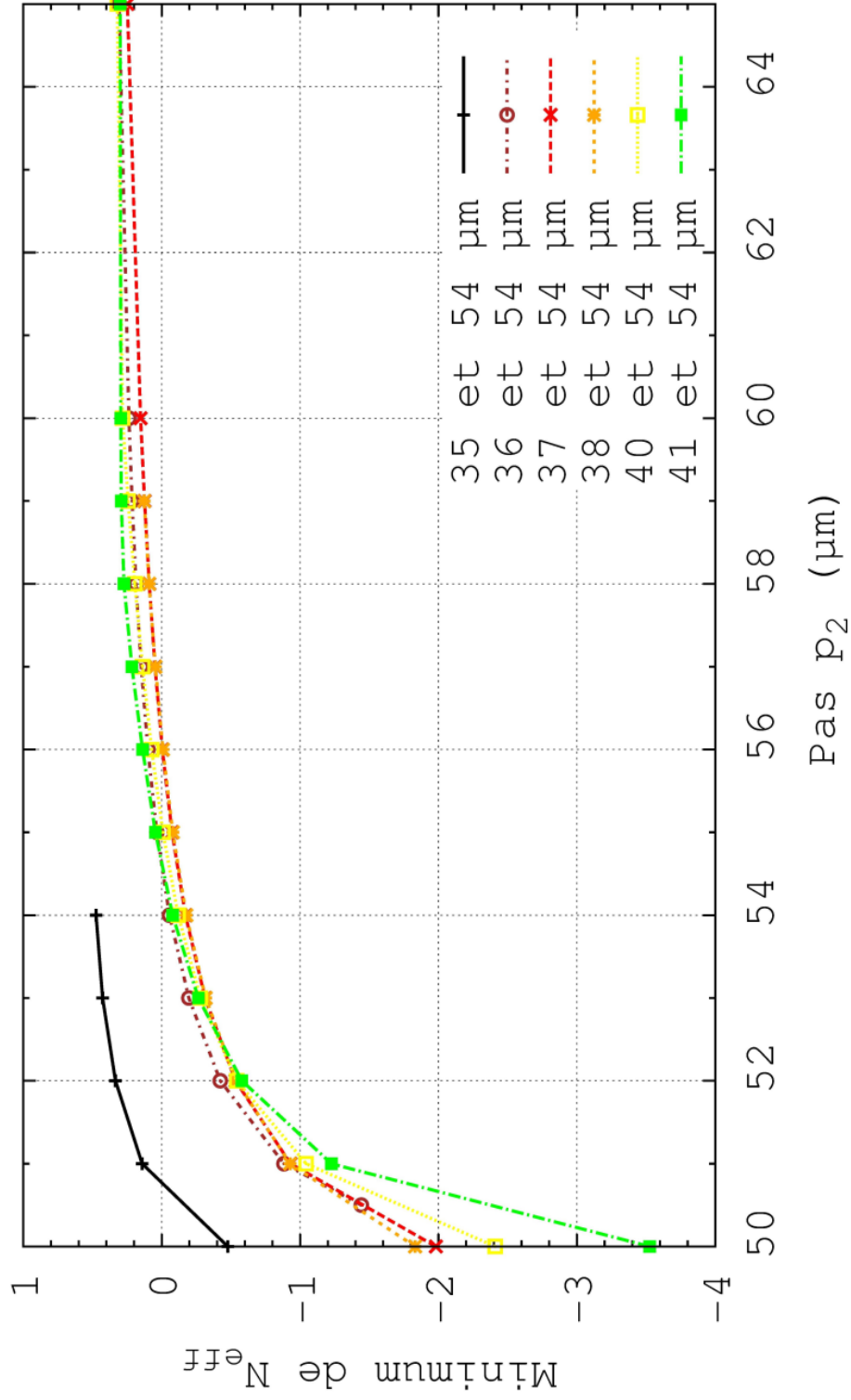


FIGURE IV.2.11 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas  $p_2$  et du côté du résonateur magnétique  $a_m$ . On étudie ainsi le couplage spatial et le couplage fréquentiel simultanément, sur un ADM à base de STO-AQ100 dont la cellule élémentaire est similaire à celle de la figure IV.2.2. On constate que l'indice *effectif* n'est négatif que pour un pas  $p_2 < 54 \mu m$  et que le couplage fréquentiel n'a un effet que pour un pas  $p_2 < 52 \mu m$ .



En partant du cas le plus intéressant de la figure IV.2.11, c'est-à-dire  $a_e = 54 \mu\text{m}$  et  $a_m = 41 \mu\text{m}$ , lorsque l'indice *effectif* est le plus négatif, on peut continuer notre étude sur le couplage fréquentiel, mais en faisant varier le côté du résonateur électrique  $a_e$  cette fois-ci. De ce manière, le minimum de l'indice *effectif* négatif est plus important, comme on le voit sur la figure IV.2.12. On atteint des valeurs très basses de l'indice négatif ( $N_{eff} = -7$ ) mais pour des valeurs du pas très petites seulement ( $p_2 = 50 \mu\text{m}$  ou  $p_2 = 51 \mu\text{m}$ ). A titre de comparaison, pour le cas où  $a_e = 55 \mu\text{m}$  et  $a_m = 41 \mu\text{m}$  avec  $p_2 = 50 \mu\text{m}$ , l'écart entre deux résonateurs n'est seulement que de  $2 \mu\text{m}$ , soit des dimensions encore plus difficiles à fabriquer.

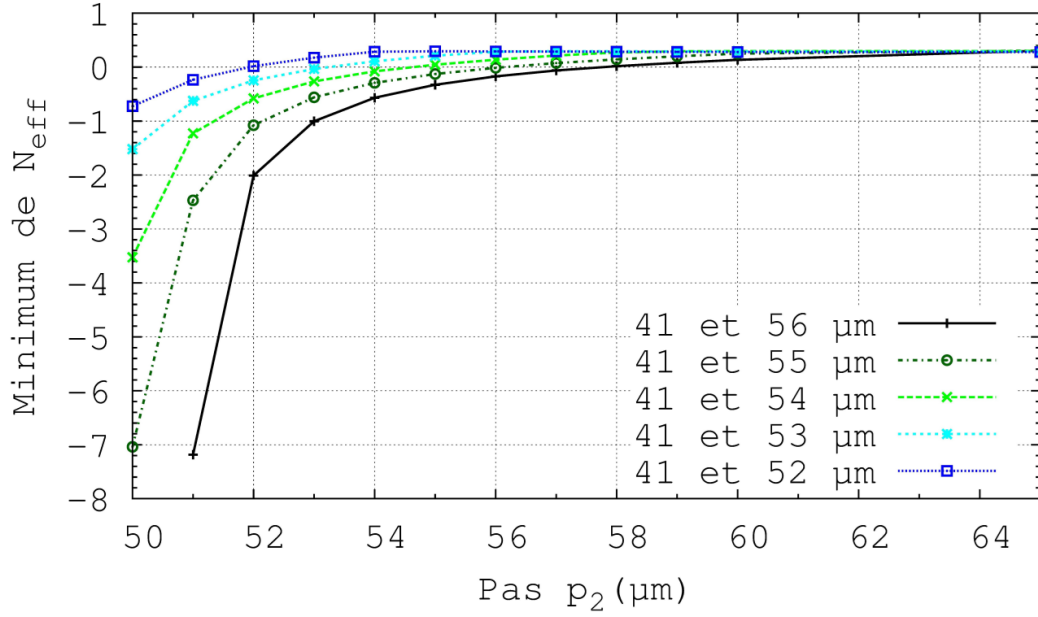


FIGURE IV.2.12 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas  $p_2$  et du côté du résonateur électrique  $a_e$ . On étudie ainsi le couplage spatial et fréquentiel simultanément, sur un ADM à base de STO-AQ100 dont la cellule élémentaire est similaire à celle de la figure IV.2.2. On constate que l'indice est négatif pour un pas inférieur à  $57 \mu\text{m}$ . Le couplage fréquentiel est important pour un pas inférieur à  $54 \mu\text{m}$  et permet d'atteindre des valeurs d'indice *effectif* très basses ( $N_{eff} = -7$  à  $51 \mu\text{m}$ ). Notons qu'au-delà de  $51 \mu\text{m}$ , pour la courbe noire, on ne mesure plus d'indice négatif car les paramètres effectifs ne sont plus physiques (bande de résonance de la partie 4.5 du chapitre II).

Pour les mêmes raisons que la figure IV.2.7, on peut se demander si l'indice négatif est surtout lié aux pertes ou vérifie malgré tout les conditions  $\epsilon'_{eff} < 0$ ,  $\mu'_{eff} < 0$  et  $Z_{eff} \approx 1$ . C'est ce que nous voyons sur la figure IV.2.14 suivante. Le cas choisi est celui où  $a_e = 56 \mu\text{m}$ ,  $a_m = 41 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 52 \mu\text{m}$ . Sur la figure IV.2.12 nous sommes dans le cas correspondant à un indice *effectif*  $N_{eff} = -2$ . On voit que malgré un indice suffisamment négatif, la partie réelle de la permittivité *effective* n'est quasiment pas négative. De plus, la figure IV.2.13 montre clairement une impédance *effective*  $Z_{eff}$  en-dessous de l'unité au niveau de la zone d'indice négatif. Ce ne sont donc pas de bonnes conditions pour un indice négatif.

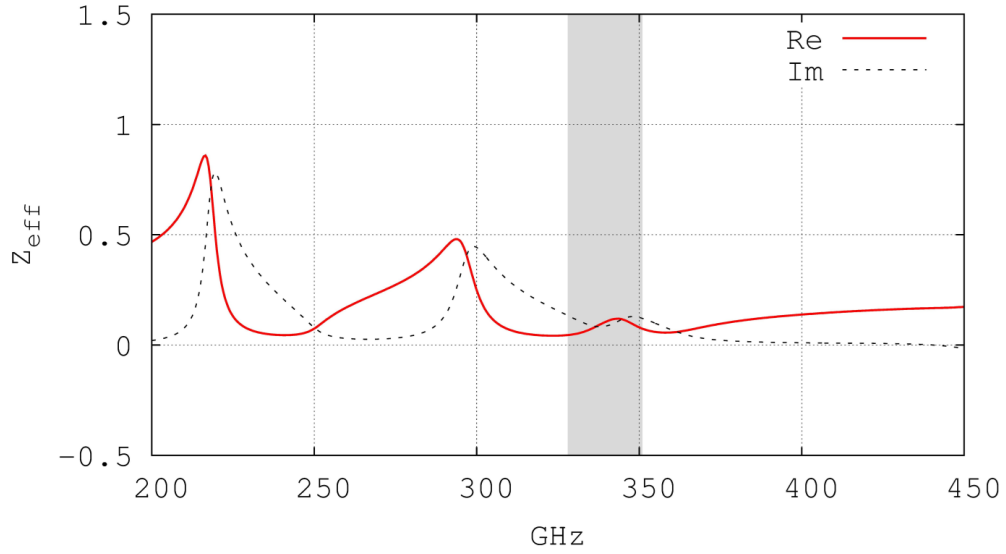


FIGURE IV.2.13 – Impédance *effective* pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO-AQ100 à section carrée avec  $a_m = 41 \mu m$ ,  $a_e = 56 \mu m$  et  $p_2 = 52 \mu m$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149].  $Z_{eff}$  dans cette zone est clairement éloignée de l'unité, ce qui n'est pas pratique.

D'autres paramètres géométriques sont à prendre en compte en cas de fabrication des dispositifs. On peut voir sur la figure IV.2.15 l'effet de la position relative des résonateurs entre eux au sein de la cellule élémentaire. Il peut arriver à la fabrication que ceux-ci ne soient pas parfaitement centrés, ainsi, connaissant la sensibilité de nos résonateurs, il était important de quantifier l'effet de ce décalage sur l'indice *effectif* négatif. Comme on peut le constater, il y a une diminution de la valeur absolue de l'indice *effectif* si les résonateurs ne sont plus centrés, diminution non négligeable puisqu'entre 40 et 50 % selon le pas du réseau.

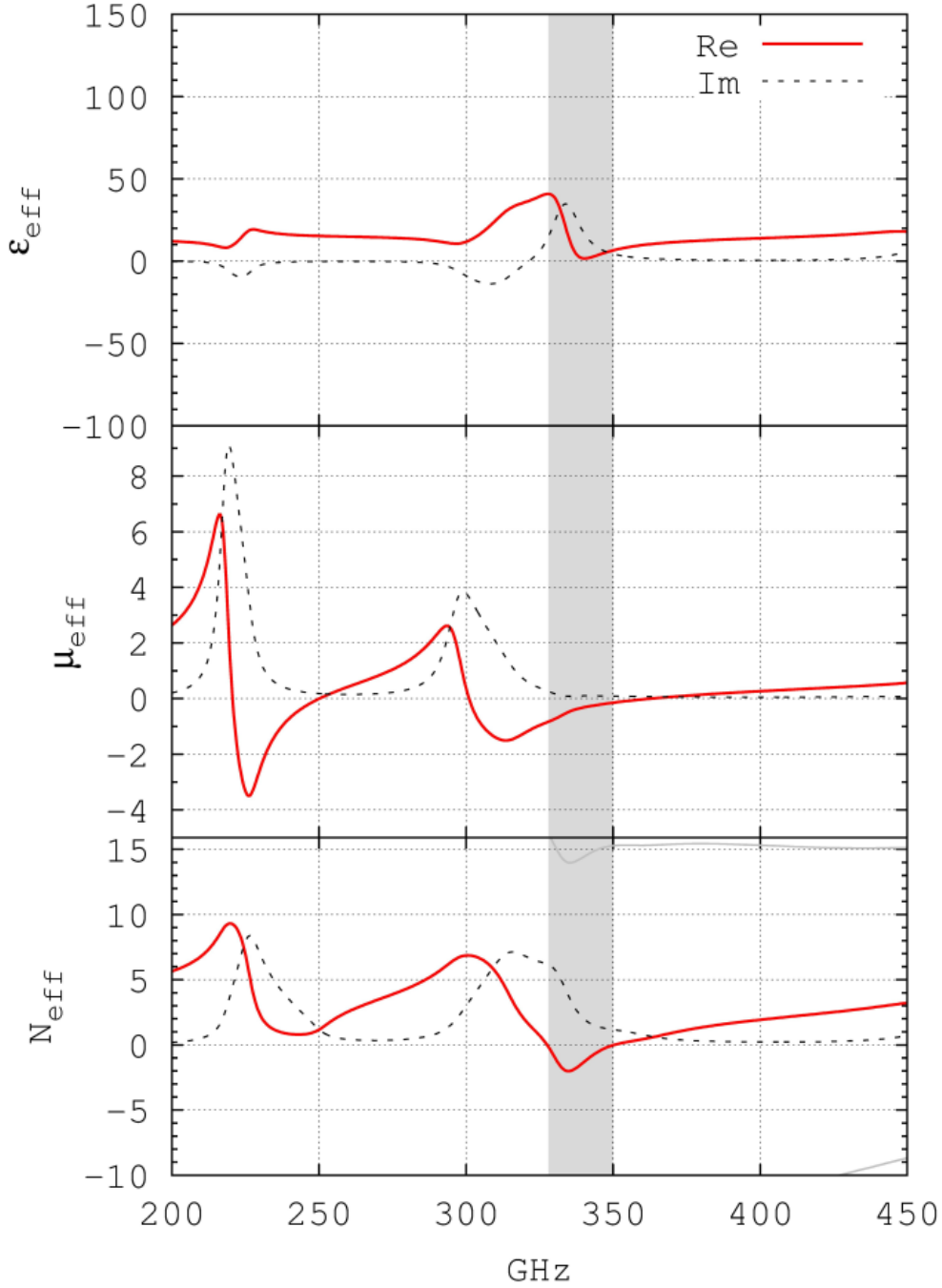


FIGURE IV.2.14 – Paramètres effectifs pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO-AQ100 à section carrée avec  $\mathbf{a}_m = 41 \mu\text{m}$ ,  $\mathbf{a}_e = 56 \mu\text{m}$  et  $\mathbf{p}_2 = 52 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149]. L'indice négatif est certes proche de  $N_{eff} = -2$  mais les parties réelles de  $\epsilon_{eff}$  et  $\mu_{eff}$  sont très proches de zéro. L'indice négatif est donc surtout lié aux pertes dans le matériau et l'impédance *effective*  $Z_{eff}$  est supérieure à l'unité comme on l'a vu sur la figure IV.2.13.

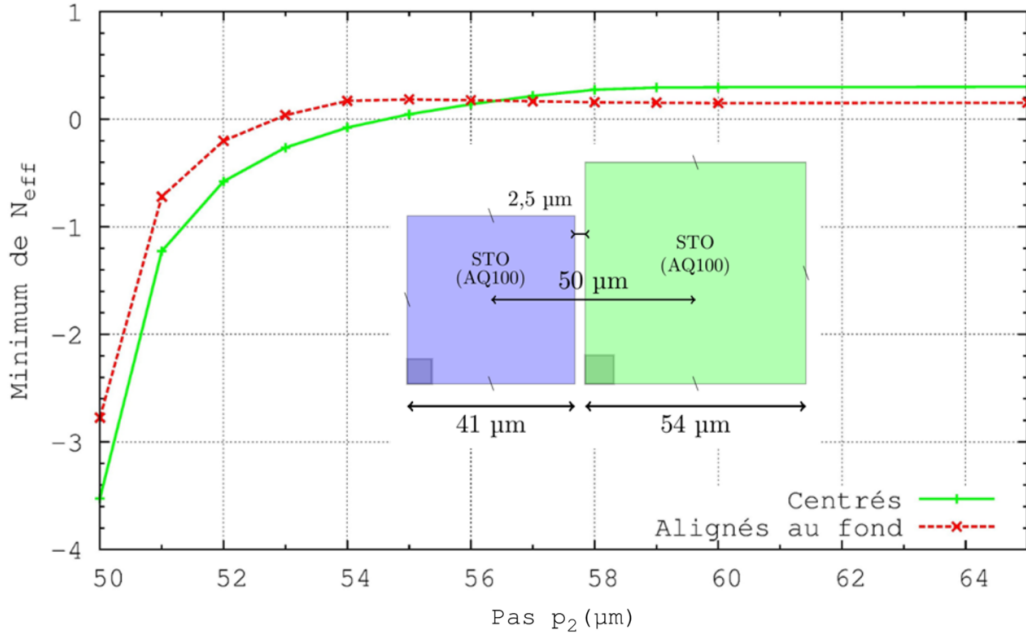


FIGURE IV.2.15 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du couplage spatial et selon la position des résonateurs entre eux, pour un ADM à base de STO-AQ 100 dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D à section carrée avec  $a_m = 41 \mu m$  et  $a_e = 54 \mu m$ . Il y a une diminution de la valeur absolue de l'indice *effectif* si les résonateurs ne sont pas centrés, diminution non négligeable puisqu'entre 40 et 50 % selon le pas du réseau.

### 2.1.7 Résonateurs rectangulaires de AQ100

Dans le cas où la fabrication ne permette pas de faire deux épaisseurs différentes pour nos cellules élémentaires à deux résonateurs, éventualité évoquée lors des échanges entre les membres du projet, il était important de s'intéresser au cas où les résonateurs ont une section rectangulaire, et non carrée. Dans le meilleur des cas, un seul des deux résonateurs serait de section carrée, l'autre ayant la longueur en commun, mais une largeur différente.

De cette manière, plusieurs cas ont été étudiés, toujours dans la configuration de Lepetit *et al.* de la figure IV.1.2 avec la superposition du mode  $TE_{11}$  d'un résonateur à section rectangulaire et du mode  $TE_{12}$  de l'autre résonateur à section rectangulaire. Nous avons étudié le cas où l'épaisseur est de  $50 \mu m$ , puis de  $54 \mu m$ , et enfin de  $100 \mu m$  (le plus facile à fabriquer), et fixé la largeur de façon à être dans la bonne gamme de fréquence. L'effet sur le minimum d'indice est visible sur la figure IV.2.16. Cette façon de faire semble bénéfique pour nos structures puisque l'indice *effectif* négatif est plus important avec des résonateurs dont l'épaisseur est de  $100 \mu m$ . On peut d'ailleurs se poser la question d'une telle différence alors que les modes  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  sont à chaque fois aux mêmes fréquences.

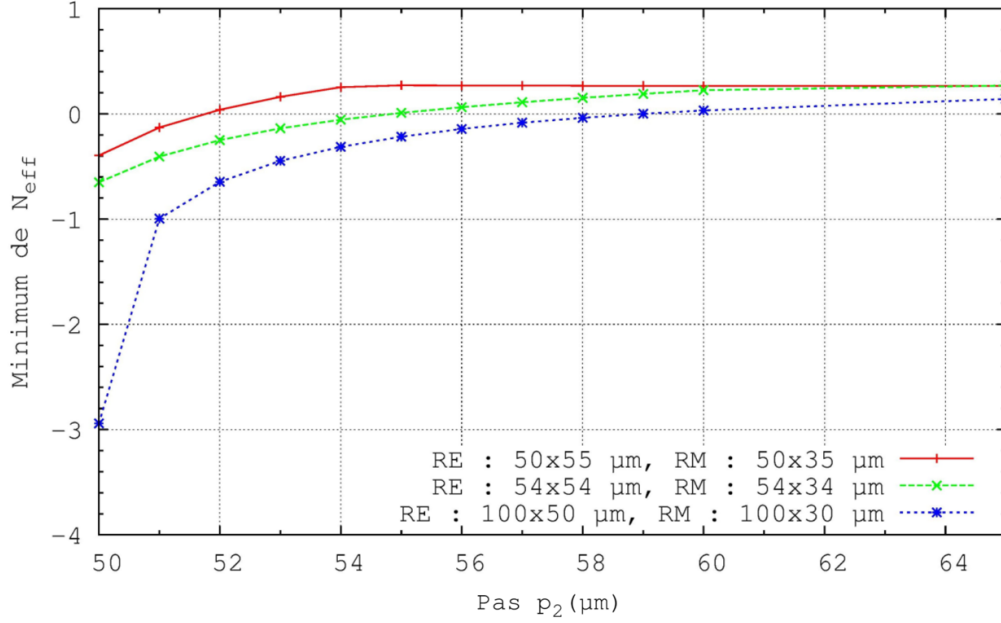


FIGURE IV.2.16 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas et du type de résonateur considéré. Dans les trois cas, c'est un ADM à base de STO-AQ 100 dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D à section rectangulaire. En rouge : le résonateur électrique (RE) a une section de  $50 \times 55 \mu\text{m}^2$ , le résonateur magnétique (RM) une section de  $50 \times 35 \mu\text{m}^2$ , soit une épaisseur de  $50 \mu\text{m}$ . En vert, l'épaisseur est de  $54 \mu\text{m}$ . En bleu, l'épaisseur est de  $100 \mu\text{m}$ . Dans ce dernier cas, l'indice négatif est clairement plus faible, ce qui laisse supposer que le couplage spatial ne fait pas tout, le couplage fréquentiel est certainement différent et c'est ce que nous allons vérifier par la suite.

En réalité, la formule (II.2.18) montre que pour un résonateur de STO rectangulaire de section  $a_1 \times a_2$  avec  $a_1 = 100 \mu\text{m}$  et  $a_2 = 50 \mu\text{m}$ , on a :

- $\text{TE}_{11} = 194 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{12} = 357 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{21} = 245 \text{ GHz}$

Et pour un résonateur de STO rectangulaire avec  $a_1 = 100 \mu\text{m}$  et  $a_2 = 30 \mu\text{m}$ , on a :

- $\text{TE}_{11} = 301 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{12} = 584 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{21} = 337 \text{ GHz}$

On voit dans ce cas que le **mode  $\text{TE}_{21}$**  pour le résonateur  $100 \times 30 \mu\text{m}^2$  est plus bas en fréquence que le **mode  $\text{TE}_{12}$**  du résonateur  $100 \times 50 \mu\text{m}^2$ . Si les modes se recouvrent ce ne sont certainement pas les mêmes qui sont en jeu dans le cas de la figure IV.1.2. Pour s'en assurer, nous avons tracé les paramètres effectifs de dispositifs ayant un pas fixe  $p_2 = 51 \mu\text{m}$  dans les trois configurations de la figure IV.2.16. Le cas où l'épaisseur est de  $50 \mu\text{m}$  est visible sur la figure IV.2.17, les modes de résonances sont identifiés ainsi que leur fréquence. Le cas où l'épaisseur est de  $54 \mu\text{m}$  est visible sur la figure IV.2.18,

les modes de résonances sont similaires aux cas précédents, avec un léger décalage, ils ne sont donc pas notés. Le cas où l'épaisseur est de  $100\ \mu\text{m}$  est visible sur la figure IV.2.19, dans ce cas l'identification des modes est plus difficile, et surtout, l'indice *effectif* négatif est particulièrement creusé, ce qui laisse à penser que les modes de résonances en jeu lors du couplage ne sont plus les mêmes.

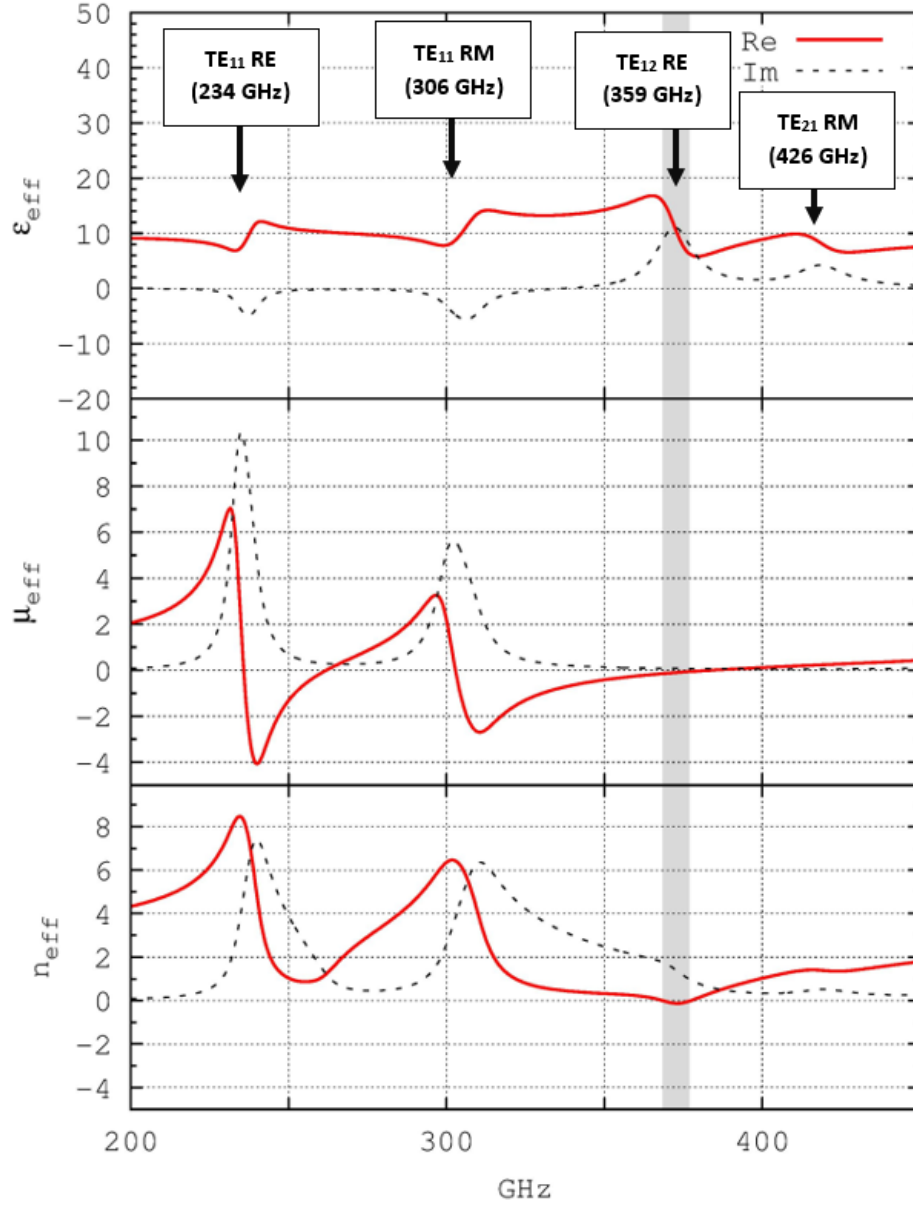


FIGURE IV.2.17 – Paramètres effectifs lorsque les résonateurs à section rectangulaire ont une épaisseur de  $50\ \mu\text{m}$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO-AQ100 de section  $50 \times 55\ \mu\text{m}^2$  et  $50 \times 35\ \mu\text{m}^2$ , avec  $p_2 = 51\ \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149]. Les modes de résonances sont identifiés ainsi que leur fréquence.

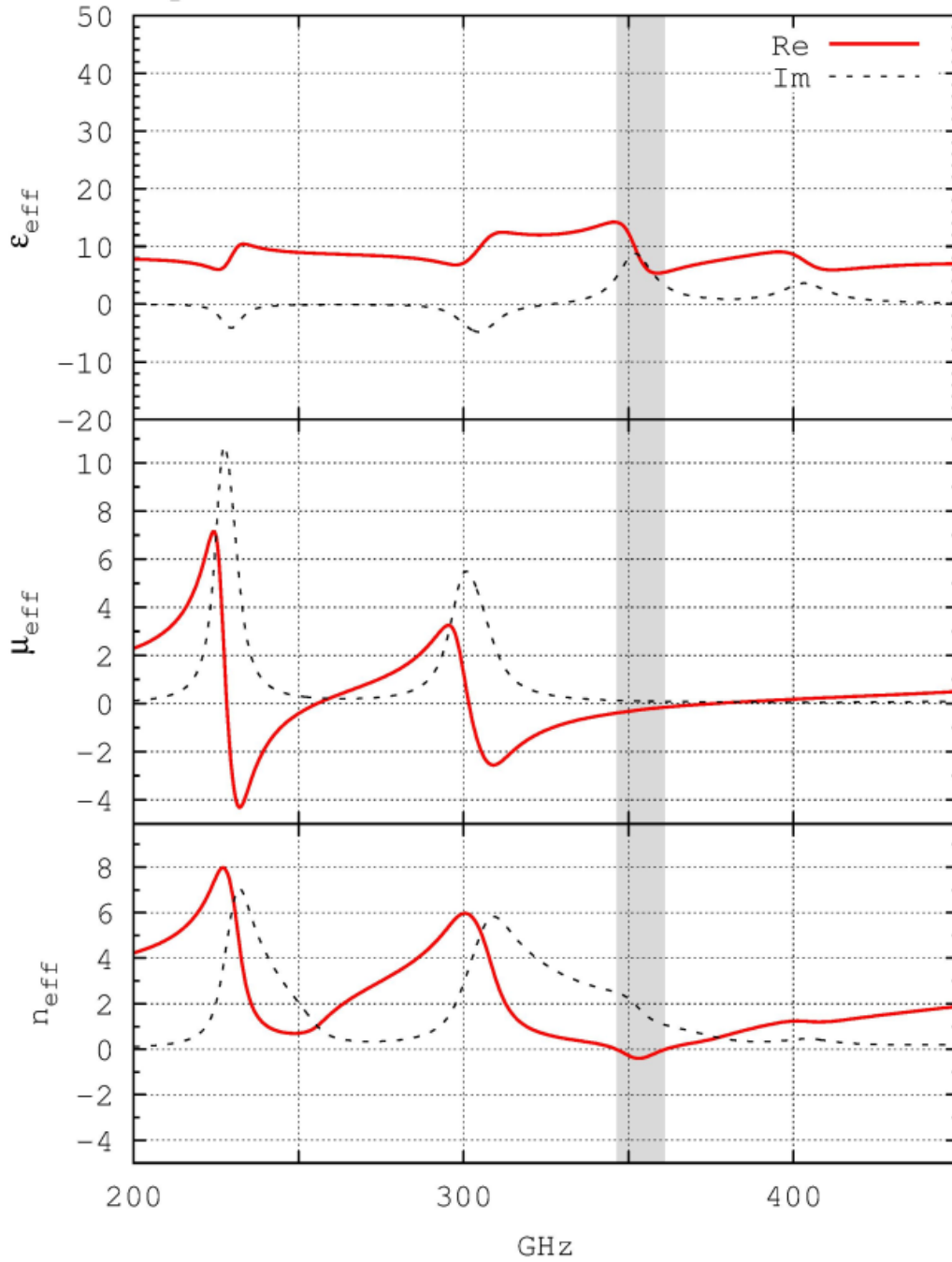


FIGURE IV.2.18 – Paramètres effectifs lorsque les résonateurs à section rectangulaire ont une épaisseur de  $54 \mu\text{m}$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO-AQ100 de section  $54 \times 54 \mu\text{m}^2$  et  $54 \times 34 \mu\text{m}^2$ , avec  $p_2 = 51 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149]. Les modes de résonances sont les mêmes que pour la figure précédente.

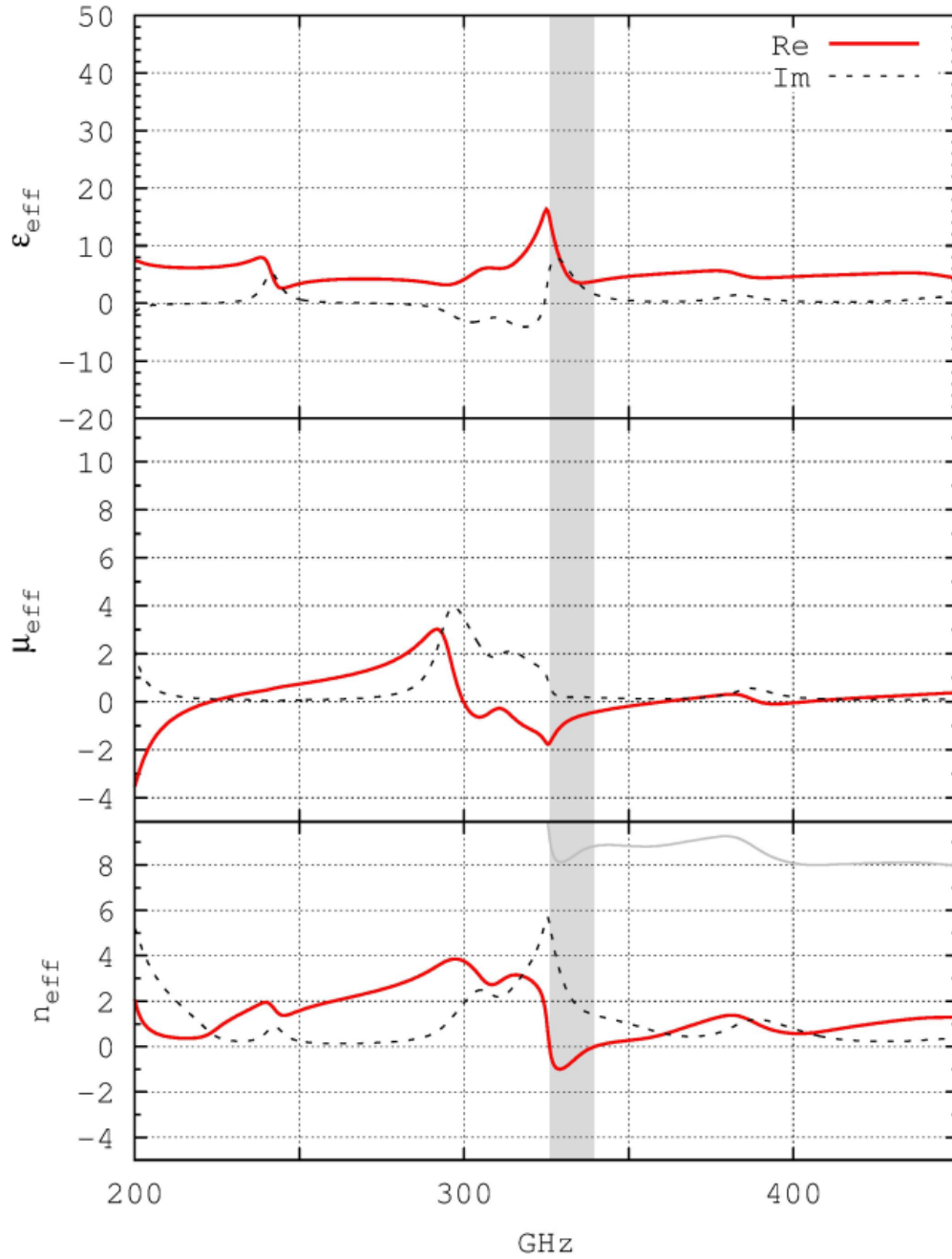


FIGURE IV.2.19 – Paramètres effectifs lorsque les résonateurs à section rectangulaire ont une épaisseur de  $100\ \mu\text{m}$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $\text{STO-AQ100}$  de section  $100 \times 50\ \mu\text{m}^2$  et  $100 \times 30\ \mu\text{m}^2$ , avec  $p_2 = 51\ \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149]. Les modes de résonances sont très différents des cas précédents. L'indice négatif est particulièrement creusé, ce qui laisse à penser que les modes de résonances mis en jeu ne sont plus les mêmes.



En réalité, les modes de résonances  $TE_{mn}$  d'un résonateur isolé (voir partie 2.2.2) ne se déplacent pas tous de la même manière. La figure IV.2.20 regroupe le déplacement des premiers modes d'un résonateur isolé à section rectangulaire  $a_1 \times a_2$  avec l'épaisseur  $a_1 = 100 \mu\text{m}$  et la largeur  $a_2$  variable. On voit que pour une largeur plus faible que  $100 \mu\text{m}$ , le mode  $TE_{12}$  électrique (en bleu) s'éloigne du mode  $TE_{11}$  magnétique (en noir), tandis que le mode  $TE_{21}$  électrique (en rouge) se rapproche. Ceci va permettre **pour un même résonateur** un couplage des modes  $TE_{21}$  et  $TE_{11}$ . Si ce couplage est suffisamment fort, qu'il soit spatial ou fréquentiel d'ailleurs, ces deux modes, de nature différente, vont permettre d'obtenir un indice *effectif* négatif, nous le verrons dans la partie suivante.

Nous voilà ? dans un cas de figure particulier, où deux modes d'un même résonateur peuvent se coupler sur une gamme de fréquence commune. On parlera dans ce cas de résonateur « bimodal ». Nous allons en voir un exemple précis dans la partie suivante.

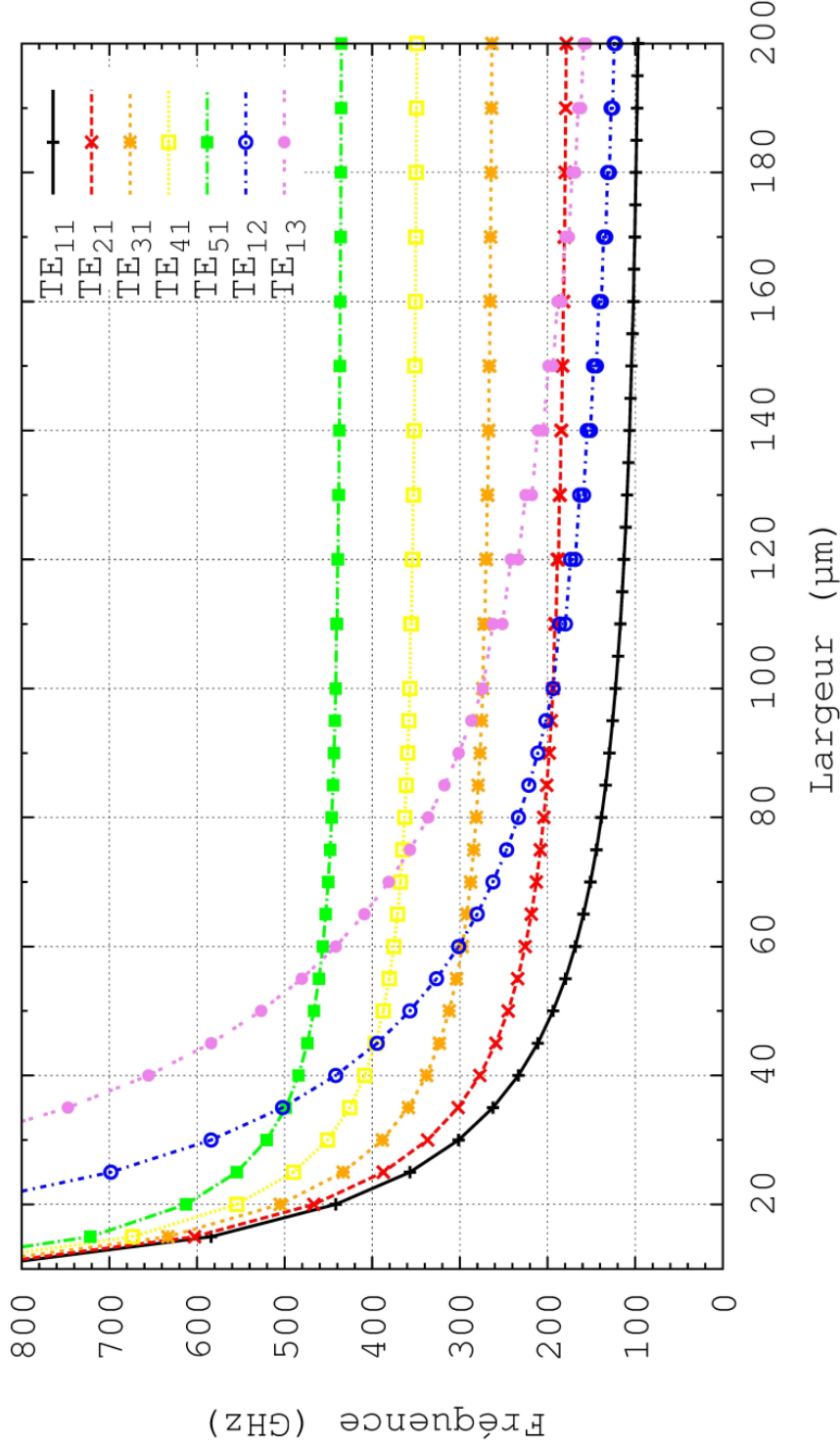


FIGURE IV.2.20 – Position théorique en fréquence des modes de résonances  $TE_{mn}$  d'un cylindre isolé 2D de STO en fonction de la largeur  $a_2$  de la section. L'épaisseur est fixe et vaut  $a_1 = 100 \mu\text{m}$ , c'est pourquoi certains modes sont confondus pour une largeur de  $100 \mu\text{m}$ . Les valeurs sont issues de la formule (II.2.18). Lorsque la largeur diminue, les modes  $TE_{11}$  (noir) et  $TE_{12}$  (bleu) s'éloignent, tandis que d'autres se rapprochent. Grâce à ce rapprochement, Les modes  $TE_{11}$  magnétique (noir) et  $TE_{21}$  électrique (rouge) **d'un même résonateur** peuvent se coupler. Lors d'un couplage suffisamment fort, ces deux modes, de nature différente, permettent d'obtenir un indice *effectif* négatif, c'est ce que nous verrons dans la partie suivante.

### 2.1.8 Cellule à un résonateur bimodal

Les observations précédentes nous ont menées à concevoir des résonateurs « bimodaux », c'est à dire des dispositifs dont la cellule élémentaire n'est composée que d'un seul résonateur, à section rectangulaire, et responsable à la fois de la résonance électrique et de la résonance magnétique (bimodal). Cependant, comme le montre la figure IV.2.21 pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'une tige diélectrique de section  $100 \times 50 \mu\text{m}^2$  avec  $p_2 = 80 \mu\text{m}$ , le fait que le mode magnétique  $TE_{11}$  et le mode électrique  $TE_{21}$  soient proches en fréquence (respectivement 195 GHz et 240 GHz) ne suffit pas pour permettre l'apparition d'un indice *effectif* négatif. Il faut encore une fois jouer sur le couplage spatial. La figure IV.2.22 considère le même dispositif, mais avec un pas  $p_2 = 60 \mu\text{m}$ . Cette fois-ci, un indice *effectif* négatif apparaît. Sur cette figure est représenté également l'amplitude du champs  $\mathbf{H}$  pour chacun des modes présents ( $TE_{11}$ ,  $TE_{21}$ ,  $TE_{31}$ ,  $TE_{41}$ ), confirmant ainsi la nature électrique ou magnétique de chacun.

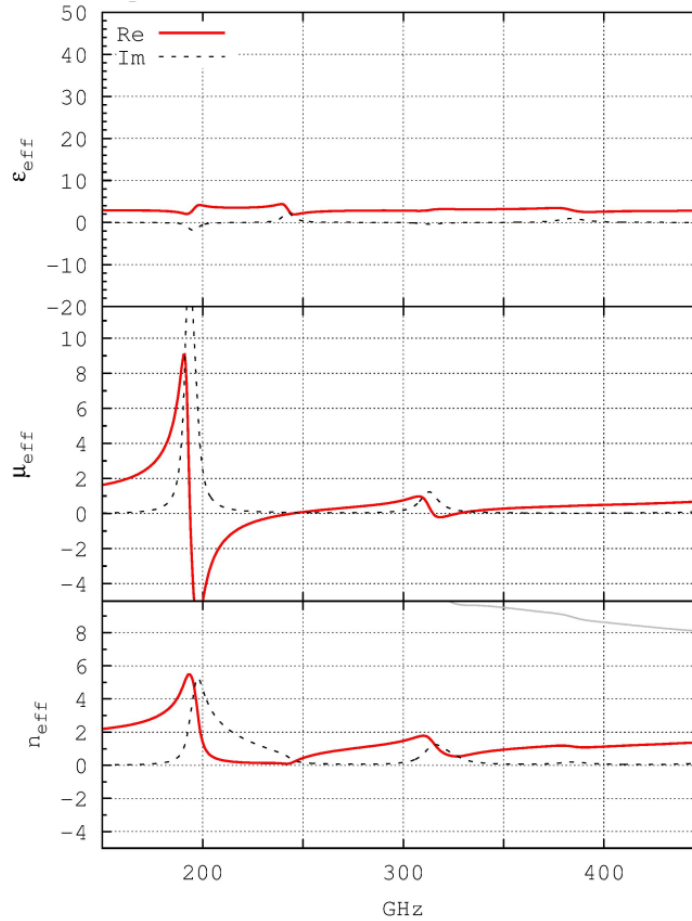


FIGURE IV.2.21 – Paramètres effectifs pour une cellule à un résonateur bimodal, avec un pas  $p_2 = 80 \mu\text{m}$ . Cas d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un cylindre 2D de STO-AQ100 à section rectangulaire de  $100 \times 50 \mu\text{m}^2$ . Dans cette configuration, malgré la présence des modes électrique et magnétique à des fréquences proches, un indice *effectif* négatif n'est pas possible.

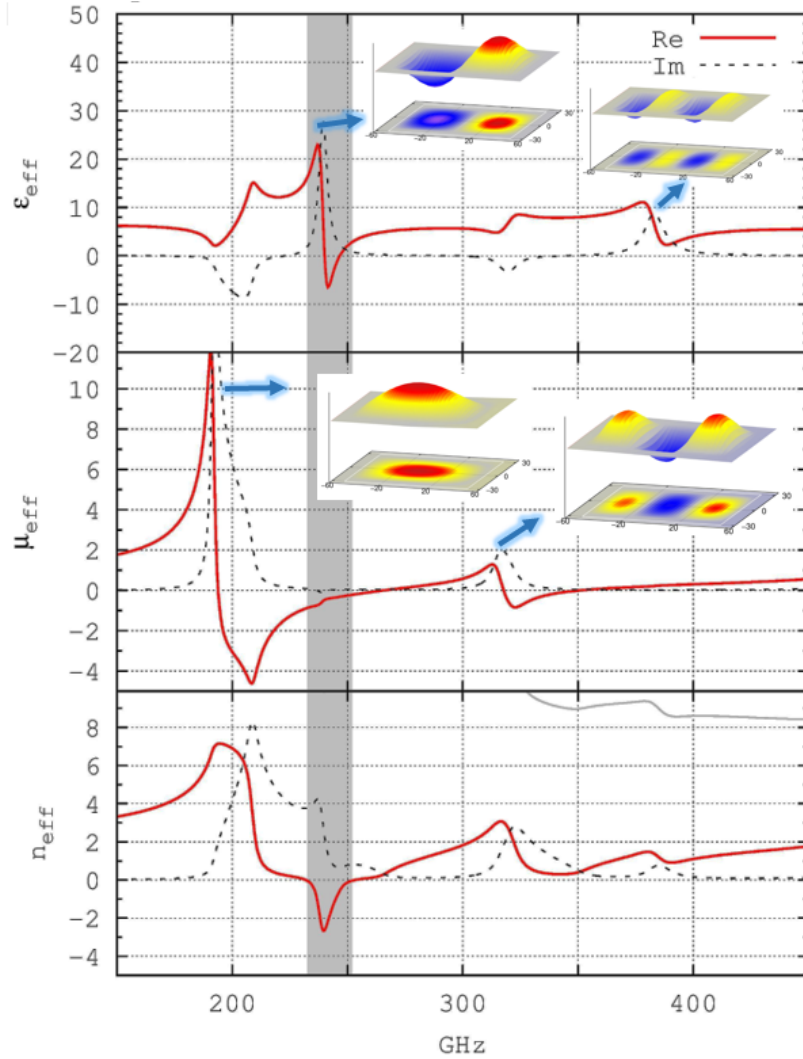


FIGURE IV.2.22 – Paramètres effectifs pour une cellule à un résonateur bimodal, avec un pas  $p_2 = 60 \mu\text{m}$ . Cas d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un cylindre 2D de STO-AQ100 à section rectangulaire de  $100 \times 50 \mu\text{m}^2$ . Dans ce cas un indice négatif est possible, la zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif, vérifiant la condition de Depine *et al.* [149]. Les insertions représentent l'amplitude du champs  $\mathbf{H}$  pour chacun des modes présents ( $TE_{11}$ ,  $TE_{21}$ ,  $TE_{31}$ ,  $TE_{41}$ ). L'indice *effectif* résulte d'une permittivité *effective* négative et d'une perméabilité *effective* négative ( $\epsilon'_{eff} < 0$  et  $\mu'_{eff} < 0$ ) dans la même gamme de fréquence, grâce au couplage spatial du mode  $TE_{11}$  et  $TE_{21}$  d'un même résonateur.

## 2.2 $\text{TiO}_2$

Le rôle limitant des pertes dans l'obtention d'un indice négatif nous a fait nous intéresser principalement au  $\text{TiO}_2$ . Ce matériau a en effet une tangente de perte d'environ 0,01 vers 0,3 THz soit plus faible que le  $\text{SrTiO}_3$  (environ 0,025) dans la même gamme de fréquence. Les propriétés du  $\text{TiO}_2$  au térahertz ont déjà été développées au chapitre III, partie 3.1.

La permittivité relative  $\epsilon_r$  plus faible du  $\text{TiO}_2$  par rapport à celle du  $\text{SrTiO}_3$  permet, à fréquence identique, de travailler avec des résonateurs cylindriques de section plus large, comme le montre l'équation (II.2.18). Ainsi, pour un résonateur cylindrique de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 94$ ) à section carrée de  $60 \mu\text{m}$  de côté, les fréquences de résonances sont :

$$TE_{11} = 365 \text{ GHz} \quad (\text{IV.2.1})$$

$$TE_{12} = 577 \text{ GHz} \quad (\text{IV.2.2})$$

et pour un résonateur à section carrée de  $90 \mu\text{m}$  les fréquences de résonances sont :

$$TE_{11} = 243 \text{ GHz} \quad (\text{IV.2.3})$$

$$TE_{12} = 384 \text{ GHz} \quad (\text{IV.2.4})$$

La figure IV.2.23 montre les paramètres effectifs  $\mu_{eff}$ ,  $\epsilon_{eff}$  et  $N_{eff}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  à section carrée. A gauche, le côté du résonateur vaut  $a_m = 60 \mu\text{m}$ . A droite, le côté du résonateur vaut  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . Dans les deux cas  $p_2 = 140 \mu\text{m}$ . On observe à droite le mode  $TE_{11}$  vers 360 GHz, celui-ci permet d'avoir  $\mu'_{eff} < 0$ . On observe à gauche le mode  $TE_{11}$  vers 250 GHz et le mode  $TE_{12}$  vers 380 GHz, ce dernier permet d'avoir  $\epsilon'_{eff} < 0$ .

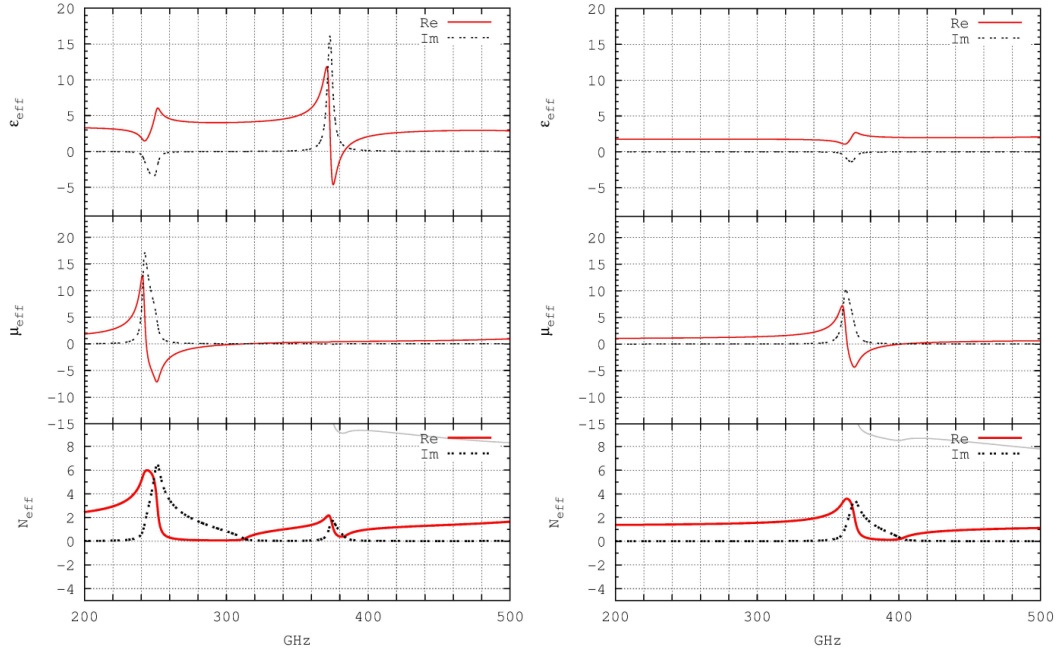


FIGURE IV.2.23 – Paramètres *effectifs* d'un ADM dont la cellule élémentaire est un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 94$   $\tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, pour deux sections différentes. A gauche, le côté du résonateur vaut  $a_m = 60 \mu\text{m}$ . A droite, le côté du résonateur vaut  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . Dans les deux cas  $p_2 = 140 \mu\text{m}$ . On observe à droite le mode  $TE_{11}$  vers 360 GHz, celui-ci permet d'avoir  $\mu'_{eff} < 0$ . On observe à gauche le mode  $TE_{11}$  vers 250 GHz et le mode  $TE_{12}$  vers 380 GHz, ce dernier permet d'avoir  $\epsilon'_{eff} < 0$ .

Ainsi, de la même manière que sur la figure IV.1.2, la superposition en fréquence du mode  $TE_{11}$  et du mode  $TE_{12}$  de ces deux résonateurs de  $\text{TiO}_2$  permet d'observer un indice *effectif* négatif vers 380 GHz, comme le montre la figure IV.2.24. L'utilisation du  $\text{TiO}_2$  nous permet donc de travailler dans la même gamme de fréquence que précédemment mais avec des tiges diélectriques de section plus importante que celles du STO. Pour cette raison, ces structures seront plus faciles à fabriquer par les membres du projet.

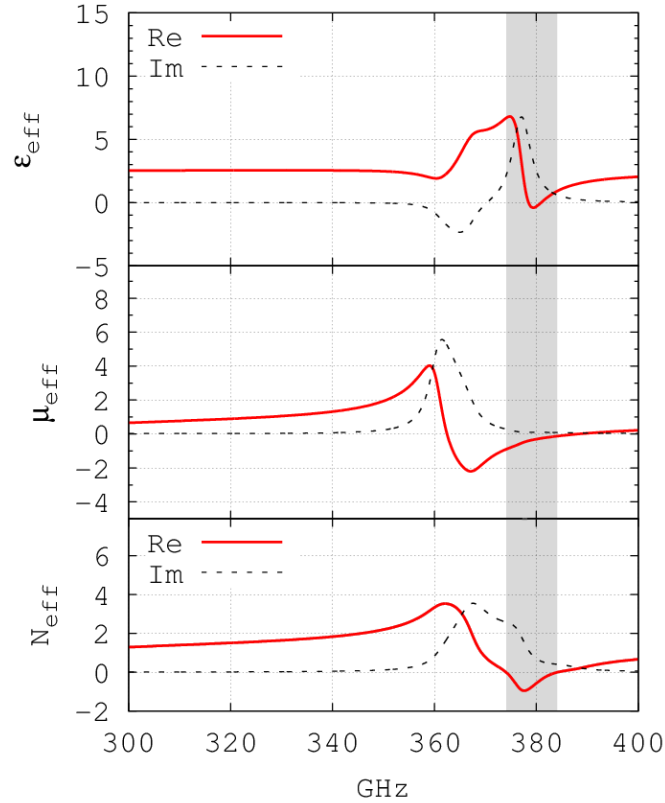


FIGURE IV.2.24 – Paramètres *effectifs* d'un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 94$   $\tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$ , et  $p_2 = 140 \mu\text{m}$ . On observe un indice *effectif* négatif vers 380 GHz, dont le minimum est atteint pour  $N_{eff} = -1$ , soit bien plus bas qu'avec le STO pour une géométrie analogue.

Afin d'améliorer cet indice *effectif* négatif au térahertz, on étudie comme précédemment le couplage spatial et le couplage fréquentiel de ce type de résonateurs.

### 2.2.1 Couplage spatial

Pris de manière indépendante, les modes  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  ne sont pas sensibles de la même manière au couplage spatial. Lippens *et al.* montrait, pour des cubes de BST ( $\epsilon_r = 200 + 2j$ ), que la position en fréquence du mode magnétique augmente si le pas diminue alors que la position en fréquence du mode électrique, à l'inverse, diminue avec le pas [150]. Pour vérifier cela, il relevait le minimum de la transmission  $S_{21}$ . En faisant

de même, on observe également ce phénomène avec nos structures. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  (en haut) et  $a_e = 90 \mu\text{m}$  (en bas) la figure IV.2.25 montre le minimum de transmission  $S_{21}$  ainsi que le maximum d'absorption<sup>11</sup> du mode magnétique  $TE_{11}$  (en haut) et du mode électrique  $TE_{12}$  (en bas) en cas de couplage spatial. On remarque, comme Lippens *et al.*, que le phénomène est visible sur minimum de la transmission  $S_{21}$ , en revanche le maximum d'absorption, qui sert parfois d'indicateur pour les modes de résonances, ne le permet pas. De plus, pour un pas très important, les valeurs convergent vers celles prédites par la formule II.2.18, soit respectivement vers 365 GHz et 384 GHz, confirmant l'intérêt de ce modèle pour prédire la position de nos résonances, mais hors couplage.

L'effet du couplage spatial est encore plus singulier lorsque les deux modes de résonances sont en jeu. La figure IV.2.26 regroupe différents paramètres que sont le minimum de transmission ( $S_{21}$ ), le maximum d'absorption, et le minimum de l'indice *effectif* pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone où l'indice *effectif* est négatif. En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. La diminution du pas  $p_2$  entraîne une montée en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode magnétique, et de manière quasi-symétrique une diminution en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode électrique. Le maximum d'absorption ne bouge quasiment pas pour les deux modes et la position correspond à la valeur prédite par la formule II.2.18 pour un résonateur isolé. La position du minimum d'indice *effectif* suit la chute du mode électrique (jusqu'à la bande de résonance). Pour des pas  $p_2$  très faibles, on observe un cas limite, un second régime de couplage pourrait-on dire, où la transmission  $S_{21}$  devient extrêmement basse (environ - 50 dB) et où le minimum de la transmission de chaque mode, au lieu de simplement se croiser comme pourrait le laisser penser la figure IV.2.25, restent à la même fréquence, pour les deux modes de résonances. Nous parlerons dans ce cas d'une « dégénérescence » de modes. Leur fréquence reste identique même lorsque l'écart entre les deux résonateurs devient encore plus faible.

Lorsqu'on regarde les champs **E** et **H** au cours de ce couplage spatial, on constate plusieurs choses. Plaçons nous pour commencer aux trois cas en insertions dans la figure IV.2.26, soit un pas  $p_2$  de 124, 140 et 170  $\mu\text{m}$ . La figure IV.2.27 regroupe les cartographies du champs **H** présent au minimum d'indice *effectif* pour ces trois cas. On constate premièrement que les modes de résonances  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  sont bien présents simultanément. Deuxièmement, on remarque que l'amplitude du champ **H** au sein du résonateur électrique augmente avec le pas, alors que c'est l'inverse pour le résonateur magnétique. Troisièmement, lorsque l'indice *effectif* négatif est le plus important ( $p_2 = 124 \mu\text{m}$ ), l'amplitude du champ **H** des modes  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  sont presque égales.

---

11. Absorption  $A = 1 - S_{21}^2 - S_{21}^2$

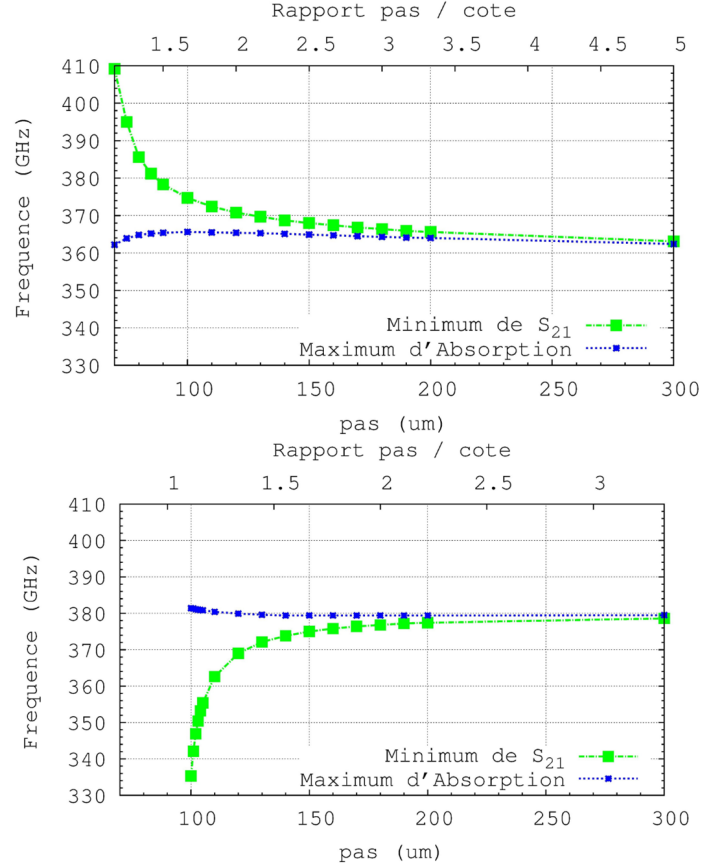


FIGURE IV.2.25 – Minimum de transmission  $S_{21}$  (en vert) et maximum d'absorption (en bleu) pour chaque mode de résonance en fonction du couplage spatial. En haut, le mode magnétique  $TE_{11}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est composé d'un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ . En bas, le mode électrique  $TE_{12}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est composé d'un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . On remarque que seul le minimum de la transmission  $S_{21}$  permet d'observer le phénomène de couplage mis en évidence dans l'article de Lippens *et al.*, le maximum d'absorption ne le permet pas [150]. Également, pour un pas très important, les valeurs convergent vers les valeurs prédites par la formule II.2.18 du résonateur isolé, soit respectivement vers 365 GHz et 384 GHz, confirmant l'intérêt de ce modèle pour prédire la position de nos résonances, mais hors couplage.



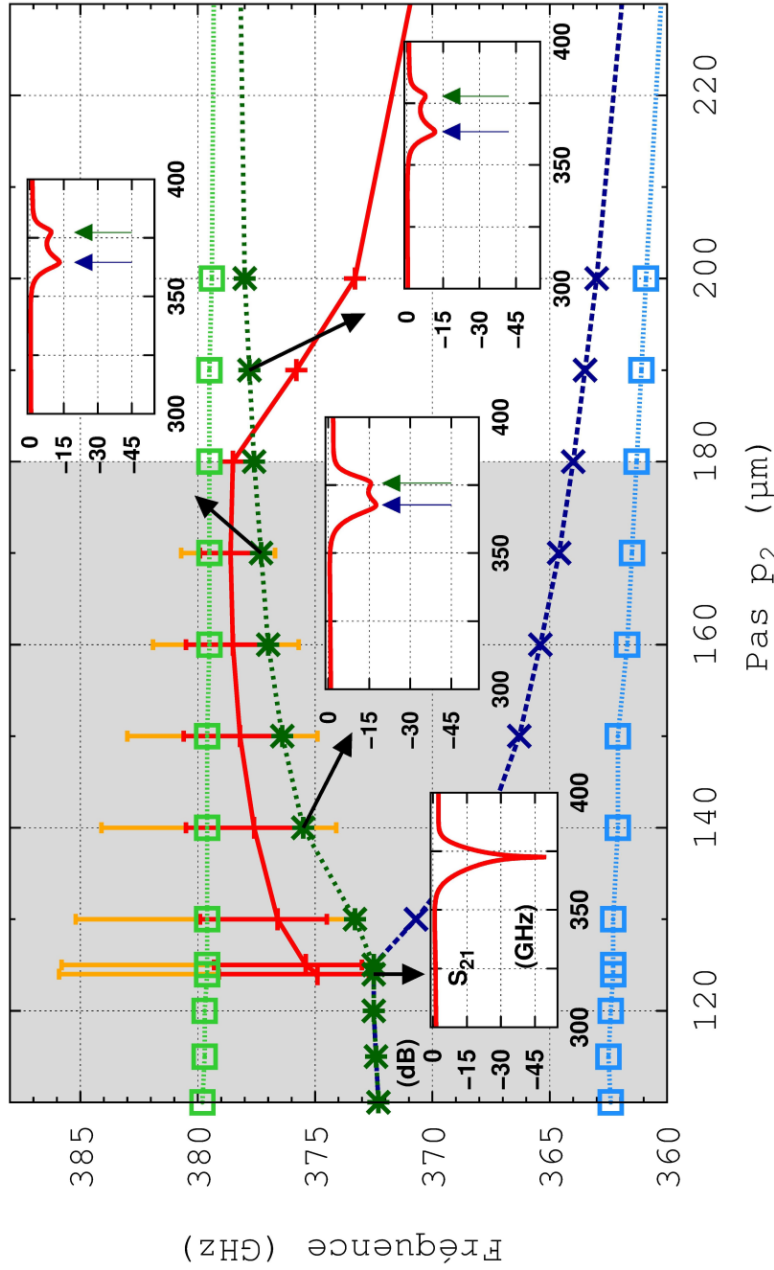


FIGURE IV.2.26 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice *effectif* (**rouge**) en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone où l'indice *effectif* est négatif. En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. La diminution du pas  $p_2$  entraîne une montée en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode magnétique, et de manière quasi-symétrique une diminution en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode électrique. Pour des pas  $p_2$  très faible, on observe un cas limite où la transmission  $S_{21}$  devient extrêmement faible ( $|S_{21}| \approx -50 \text{ dB}$ ) et où les minima de la transmission pour chaque mode, au lieu de simplement se croiser comme pourrait le laisser penser la figure IV.2.25 restent à la même fréquence. On parle de dégénérescence de modes.

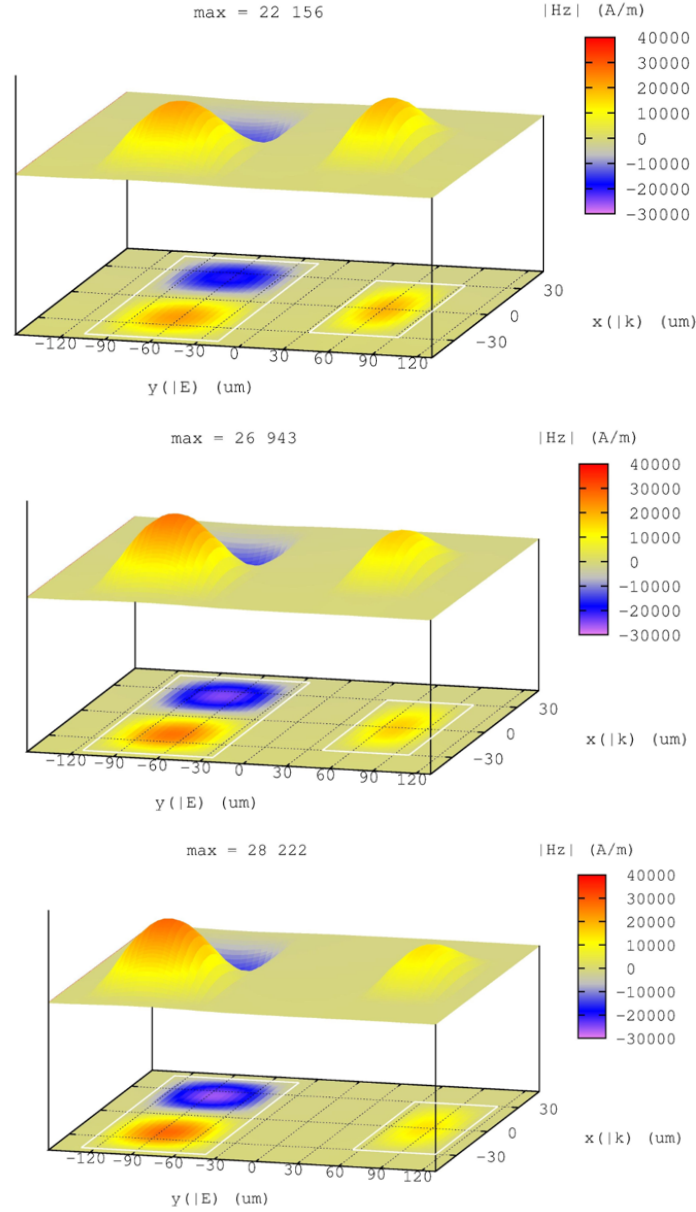


FIGURE IV.2.27 – Amplitude du champ  $\mathbf{H}$  pour trois pas  $p_2$  de respectivement 124, 140 et 170  $\mu\text{m}$  (de haut en bas) au sein de la cellule élémentaire d'un ADM composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  (droite) et  $a_e = 90 \mu\text{m}$  (gauche) lorsqu'on est au minimum de l'indice *effectif*. Les fréquences sont de respectivement : 374,9, 377,6 et 378,6 GHz. On retrouve les mêmes modes que sur la figure II.4.3. Il est intéressant de noter que l'amplitude du champ  $\mathbf{H}$  au sein du résonateur électrique augmente avec le pas, et que l'indice *effectif* négatif le plus important ( $p_2 = 124 \mu\text{m}$ ) s'obtient pour des amplitudes de champs  $\mathbf{H}$  similaires dans les deux résonateurs (Champ  $H_{TE_{12}}$  max = 22 156  $\text{A.m}^{-1} \approx$  Champ  $H_{TE_{11}}$  max = 19 647  $\text{A.m}^{-1}$ ).

Précisons-le, car ce n'est pas visible sur ces figures, mais les modes  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  oscillent avec un léger déphasage (entre 30 et 60 degrés), et ce quel que soit le pas du réseau considéré. A aucun moment les modes de résonances oscillent en phase, que l'on soit dans la zone de dégénérescence, hors dégénérescence, dans la zone d'indice négatif, ou hors de la zone d'indice négatif.

Quatrièmement, sur la cartographie du champ  $\mathbf{E}$  de la figure IV.2.28, le couplage spatial est particulièrement visible puisque le champ  $\mathbf{E}$  devient de plus en plus fort entre les résonateurs lorsque le pas diminue, et devient légèrement plus faible à l'intérieur du résonateur. Ceci ne s'observe pas sur les cartographies du champ  $\mathbf{H}$ , il est donc nécessaire de s'intéresser à chacune de ces distributions séparément.

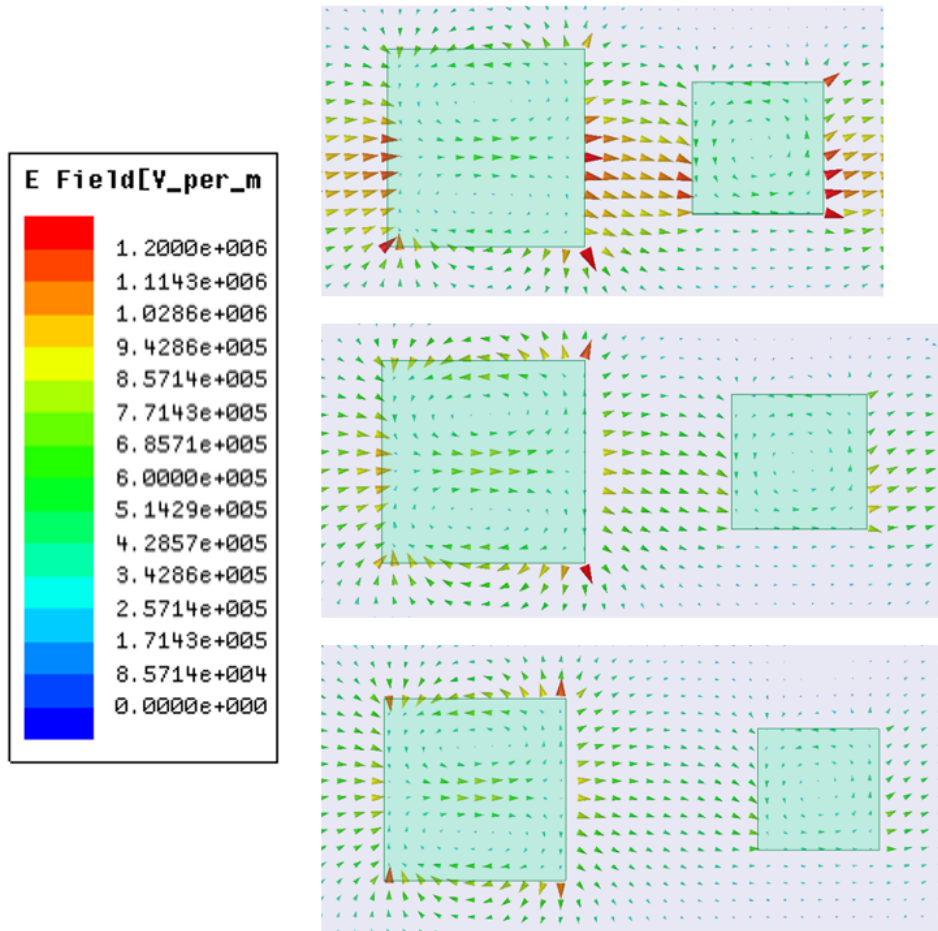


FIGURE IV.2.28 – Amplitude du champ  $\mathbf{E}$  pour **trois pas  $p_2$  de respectivement 124, 140 et 170  $\mu\text{m}$**  (de haut en bas) au sein de la cellule élémentaire d'un ADM composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  (droite) et  $a_e = 90 \mu\text{m}$  (gauche) lorsqu'on est au minimum de l'indice *effectif*. On retrouve les mêmes modes que sur la figure II.4.4. On remarque que l'intensité du champ  $\mathbf{E}$  entre les résonateurs est plus important pour un pas faible. De plus, à l'intérieur du résonateur électrique, le champ  $\mathbf{E}$  diminue très légèrement avec le pas, et il augmente très légèrement à l'intérieur du résonateur magnétique, ce qui semble suivre l'évolution du champ  $\mathbf{H}$ .

### 2.2.2 Couplage fréquentiel

Le couplage fréquentiel est lui aussi singulier lorsque les deux modes de résonances sont en jeux. La figure IV.2.29 regroupe les mêmes paramètres que la figure IV.2.26 mais lorsque le côté  $a_e$  du résonateur électrique varie. Le pas du réseau est fixé à  $p_2 = 130 \mu\text{m}$ . On le voit sur  $S_{21}$ , l'augmentation de  $a_e$  fait diminuer en fréquence le mode électrique, comme le prédit l'équation II.2.18, et lorsque celui-ci est trop proche en fréquence du mode magnétique, un phénomène de couplage apparaît : le minimum de  $S_{21}$  du mode magnétique se met à monter en fréquence jusqu'à ce que les deux modes se couplent et entrent en dégénérescence, vers 372 GHz. Sur cette figure, nous nous sommes arrêté à la limite de la bande de résonance, c'est à dire lorsque l'indice *effectif* n'est plus possible à extraire. Nous pouvons néanmoins continuer avec un côté  $a_e$  plus important, les paramètres S sont toujours mesurables et la dégénérescence se maintient.

Cette dégénérescence va se prolonger sur 6-7 GHz environ, on le voit sur la figure IV.2.30 qui montre exactement **les mêmes paramètres** que la figure IV.2.29 mais avec un pas  $p_2 = 150 \mu\text{m}$ . Le côté du résonateur électrique  $a_e$  peut ainsi monter jusqu'à  $100 \mu\text{m}$  et l'on observe que la dégénérescence prend fin vers 362 GHz, pour  $a_e = 95 \mu\text{m}$  environ. Au-delà, on retrouve la figure de couplage vu précédemment, mais inversée.

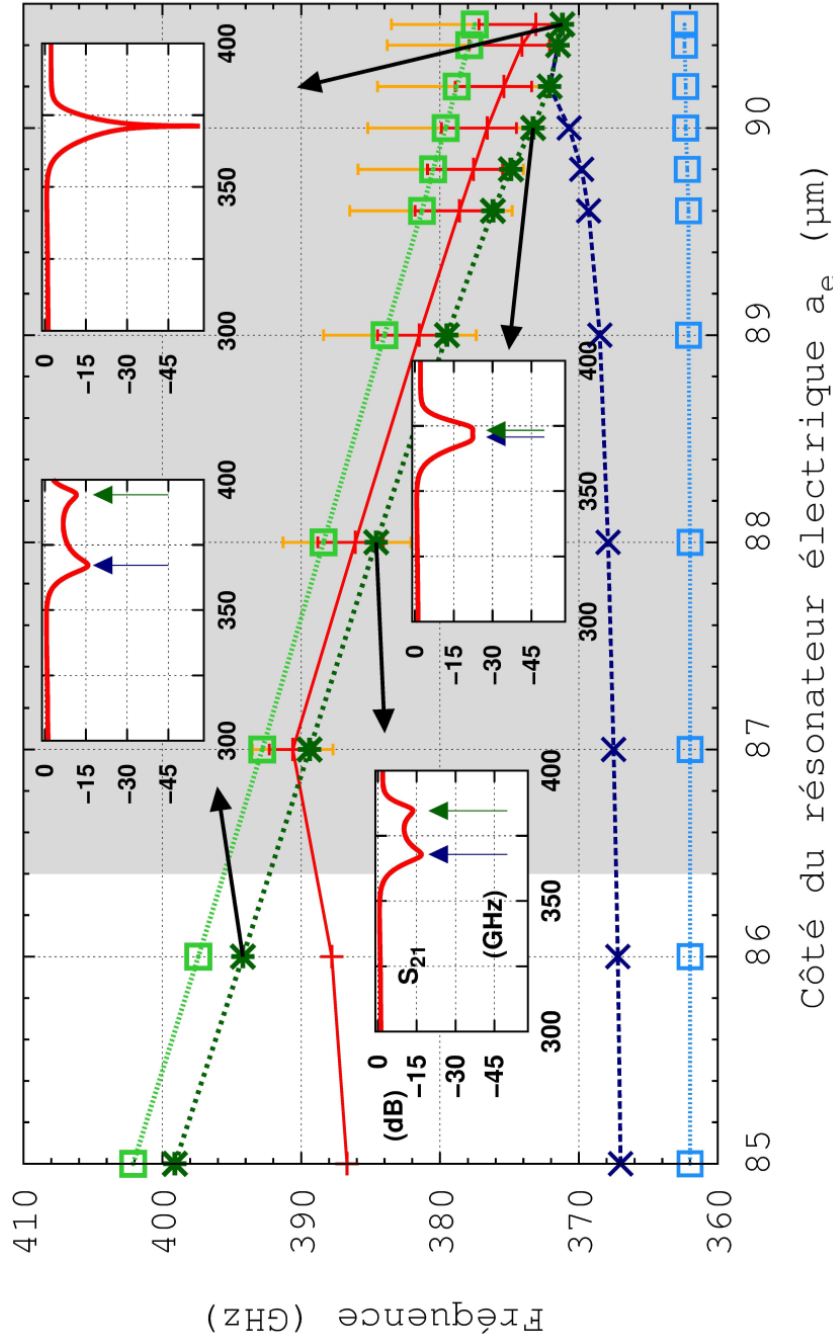


FIGURE IV.2.29 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice *effectif* (**rouge**) en fonction de  $a_e$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e$  variable. Le pas est fixe à  $p_2 = 130 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone où l'indice *effectif* est négatif. En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. L'augmentation du côté du résonateur électrique  $a_e$  entraîne une montée en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode magnétique, et de manière quasi-synchrone une diminution en fréquence du minimum de transmission  $S_{21}$  pour le mode électrique, ce jusqu'à la dégénérescence de modes, qui se maintient.

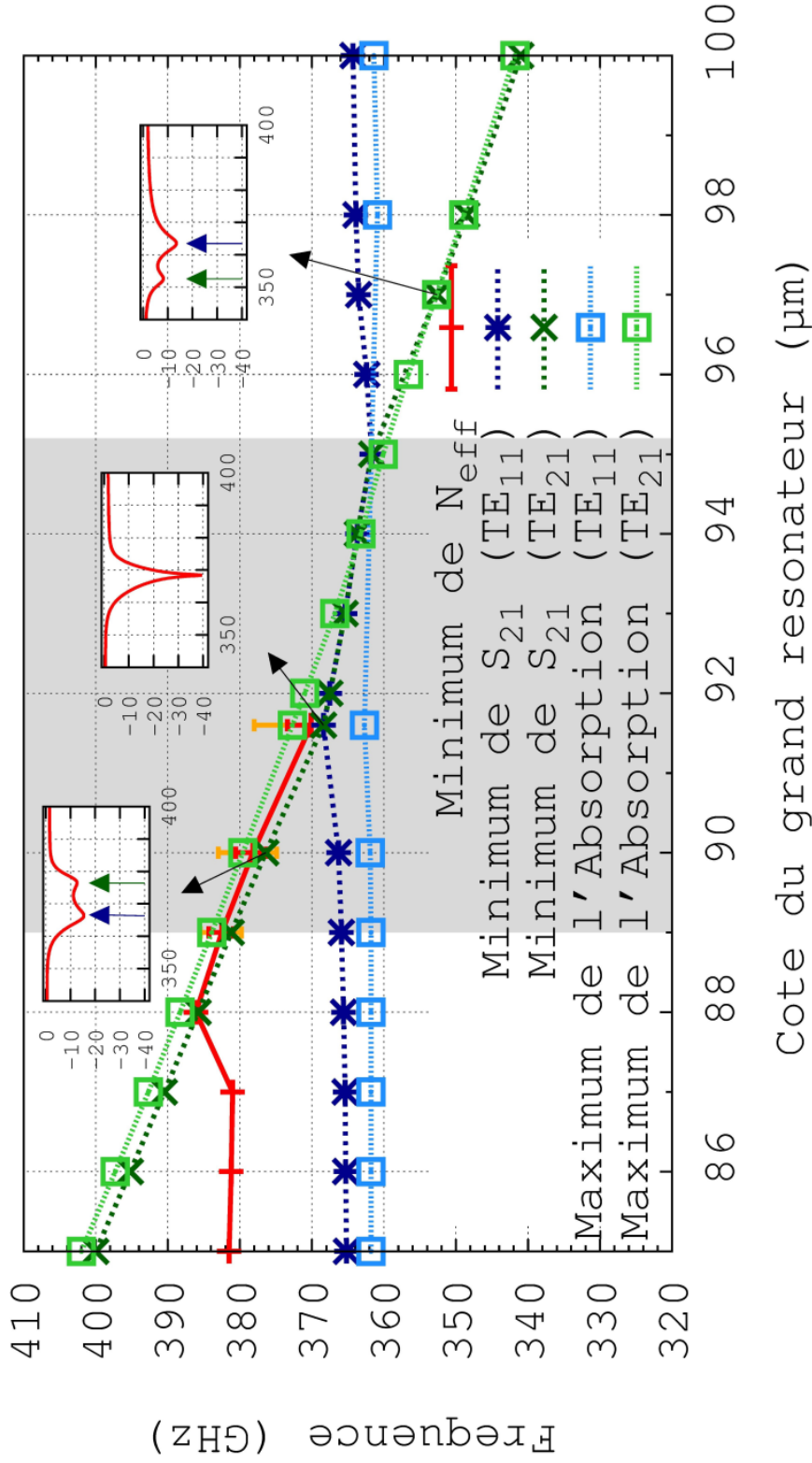


FIGURE IV.2.30 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice effectif (**rouge**) en fonction de  $a_e$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e$  variable. Le pas est fixé à  $p_2 = 150 \mu\text{m}$ . La zone grise correspond à la zone où l'indice effectif est négatif. En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. On voit qu'une dégénérescence de mode a lieu sur la gamme [362-368] GHz.

### 2.2.3 Indice négatif

Le couplage spatial et le couplage fréquentiel ont un effet favorable sur le minimum de l'indice *effectif*. Le cas du couplage spatial est visible sur la figure IV.2.31 où l'on voit une diminution progressive du minimum d'indice lorsque le pas  $p_2$  diminue, jusqu'à atteindre une valeur  $N_{eff} = -2$ . Pour  $p_2 = 124 \mu\text{m}$ , on entre dans le régime de fort couplage (partie 4.5) où les paramètres effectifs ne sont plus continus. En insertion, la partie réelle et imaginaire de l'indice *effectif* au point correspondant.

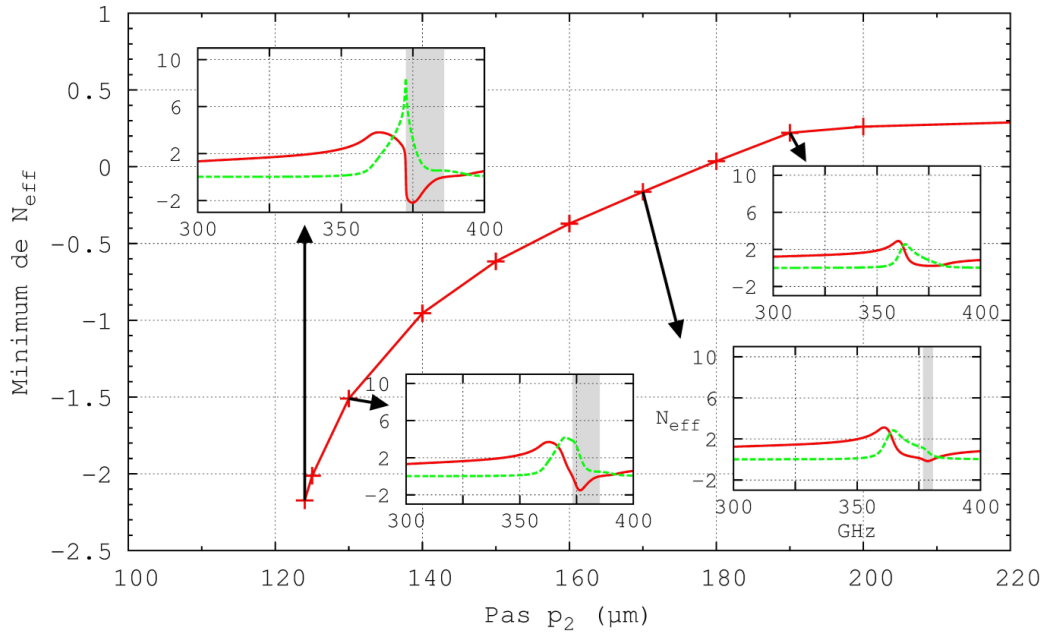


FIGURE IV.2.31 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ , soit les mêmes conditions que la figure IV.2.29. En insertion, la partie réelle (rouge) et imaginaire (verte) de l'indice *effectif* au point correspondant. On observe une diminution progressive de l'indice lorsque le pas diminue, jusqu'à atteindre une valeur limite de -2. Elle est atteinte pour un pas de  $124 \mu\text{m}$ , au-delà on entre dans la bande de résonance.

Le cas du couplage fréquentiel est visible sur la figure IV.2.32, où l'on voit une diminution progressive du minimum d'indice lorsque  $a_e$  augmente, jusqu'à atteindre une valeur limite  $N_{eff} = -2$ . Elle est atteinte pour un côté  $a_e = 90,6 \mu\text{m}$ , on entre ensuite dans la bande de résonance. En insertion, la partie réelle et imaginaire de l'indice *effectif* au point correspondant.



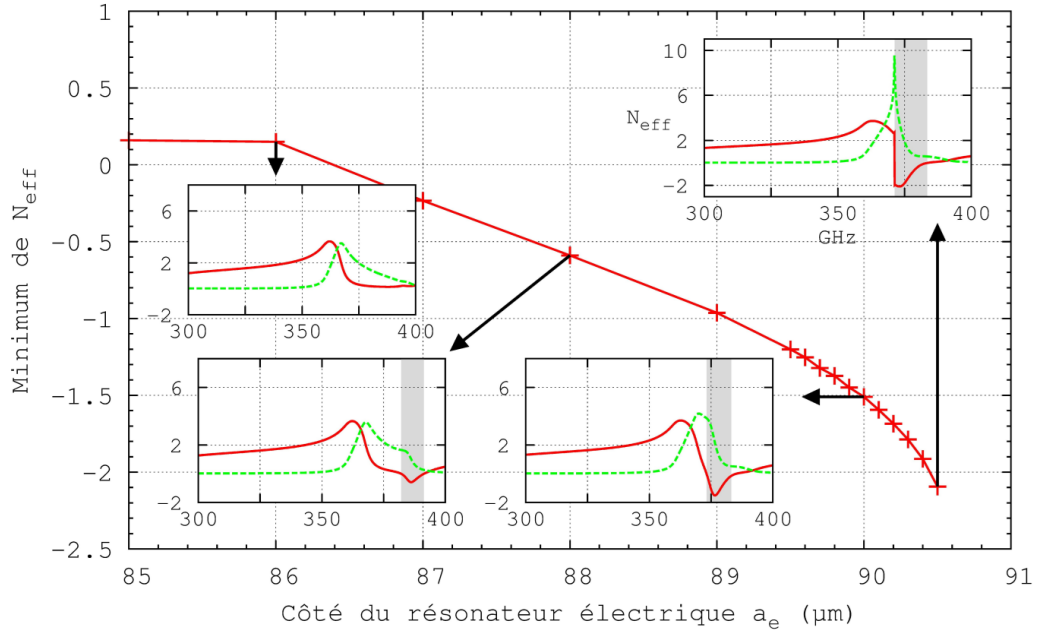


FIGURE IV.2.32 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du côté du résonateur électrique  $a_e$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e$  variable et  $p_2 = 130 \mu\text{m}$ . En insertion, la partie réelle (rouge) et imaginaire (verte) de l'indice *effectif* au point correspondant. On observe une diminution progressive de l'indice lorsque  $a_e$  augmente, jusqu'à atteindre  $N_{eff} = -2$ . Cette limite est atteinte pour un côté  $a_e = 90,6 \mu\text{m}$ .



### 2.2.4 Métamatériau multicouche

Tous les dispositifs simulés jusqu'à présent ne comportaient qu'une seule couche dans le sens de propagation de l'onde  $\mathbf{k}$ . Il est cependant important de connaître l'effet du nombre de couches d'ADM sur les paramètres effectifs, d'autant plus que nos diélectriques sont sensibles au couplage, nous venons de le voir. Si l'on considère chaque mode de résonance  $TE_{11}$  et  $TE_{12}$  indépendamment, via une cellule élémentaire mono-mode pour chaque cas, en augmentant progressivement le nombre de couches, on remarque une convergence des parties réelles de l'indice *effectif* avec le nombre de couches. La figure IV.2.33 s'intéresse au mode  $TE_{11}$  d'un résonateur de  $60 \mu\text{m}$  de côté. On remarque une nette diminution de l'amplitude de l'indice *effectif* à la résonance pour un nombre de couche augmentant jusqu'à 10, puis une convergence s'observe et se maintient jusqu'à 30 couches, soit environ 3 fois la longueur d'onde incidente.

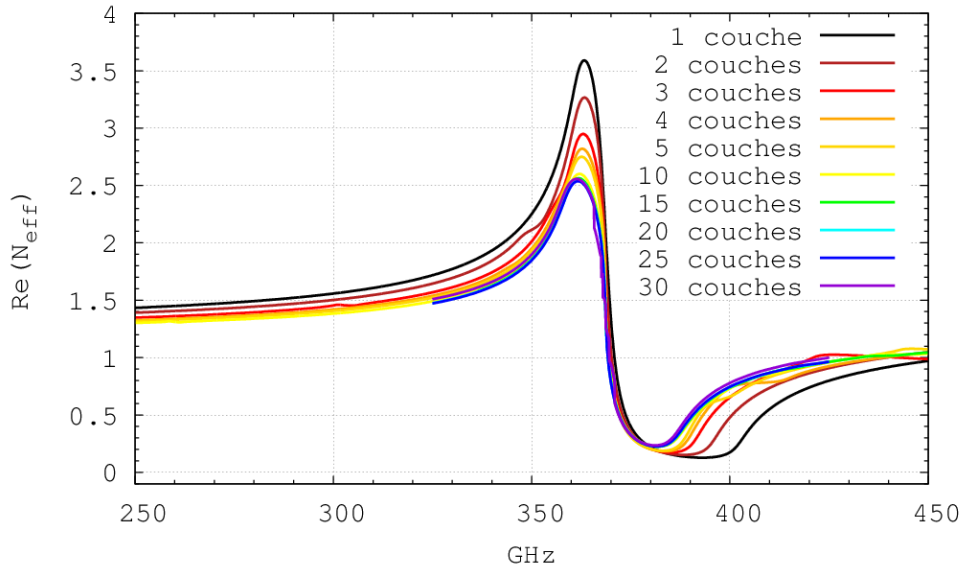


FIGURE IV.2.33 – Partie réelle de l'indice *effectif* en fonction du nombre de couches. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un seul cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 140 \mu\text{m}$  dans les directions  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{k}$  (la maille est carrée). Il y a une nette diminution de l'amplitude de l'indice *effectif* à la résonance pour un nombre de couche augmentant jusqu'à 10, puis une convergence s'observe et se maintient jusqu'à 30 couches, soit environ 3 fois la longueur d'onde incidente.

La même chose s'observe sur le mode  $TE_{12}$  d'un résonateur de  $90 \mu\text{m}$  de côté, avec un pas  $p_2 = 210 \mu\text{m}$  pour rester dans le même rapport pas/côté. Le résultat est tracé sur la figure IV.2.34, on observe une convergence des paramètres effectifs encore plus rapidement, dès 6 couches, et ce jusqu'à 20 couches.

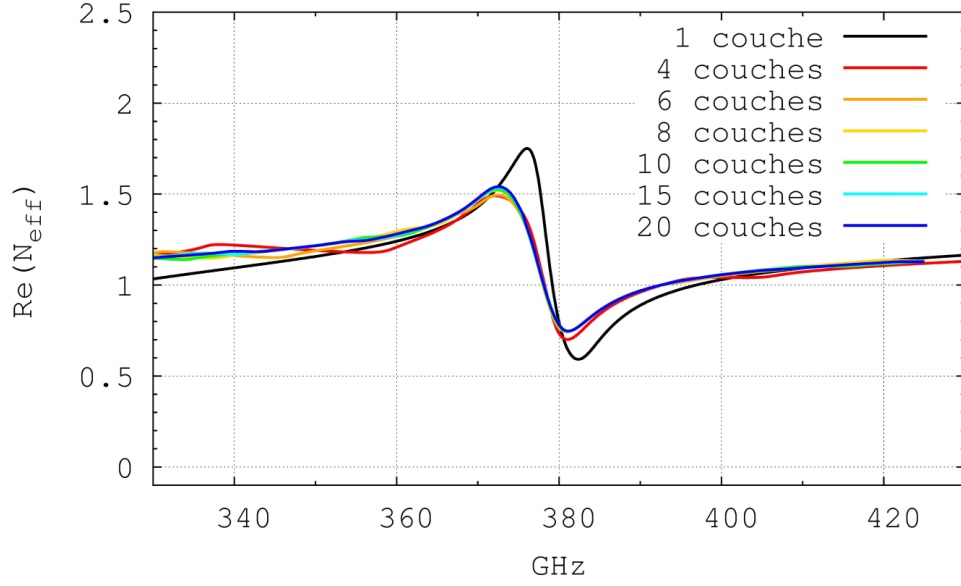


FIGURE IV.2.34 – Partie réelle de l'indice *effectif* en fonction du nombre de couches. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un seul cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 90 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 210 \mu\text{m}$  dans les directions  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{k}$  (la maille est carrée). Une convergence de l'indice *effectif* s'observe au-delà de 6 couches et se maintient jusqu'à 20 couches, soit environ 2 fois la longueur d'onde incidente.

En combinant les deux modes, on peut voir l'effet du nombre de couches sur l'indice *effectif* négatif. Le fait de travailler à plusieurs couches, ou à trois dimensions, comme nous le verrons dans la partie 2.2.5, nous pousse à réfléchir sur la manière de positionner les résonateurs les uns par rapport aux autres. En effet, nos structures étant particulièrement sensibles au couplage, leur position relative dans l'espace aura une influence importante sur les paramètres effectifs extraits. Dans le cas 2D, avec couches multiples, il existe au moins deux manières de faire se succéder les couches : soit par une simple translation de la première couche, en disposant les résonateurs électriques et magnétiques alignés dans le sens de propagation, cette disposition « linéaire » est schématisée à gauche sur la figure IV.2.35, soit de manière alternée, en « quinconce » comme schématisé à droite sur cette même figure. De cette façon les plus proches voisins de chaque résonateur sont tous de nature différente, cela aura d'ailleurs un effet favorable sur le couplage, c'est pourquoi nous avons adopté celle-ci pour avoir un indice négatif.

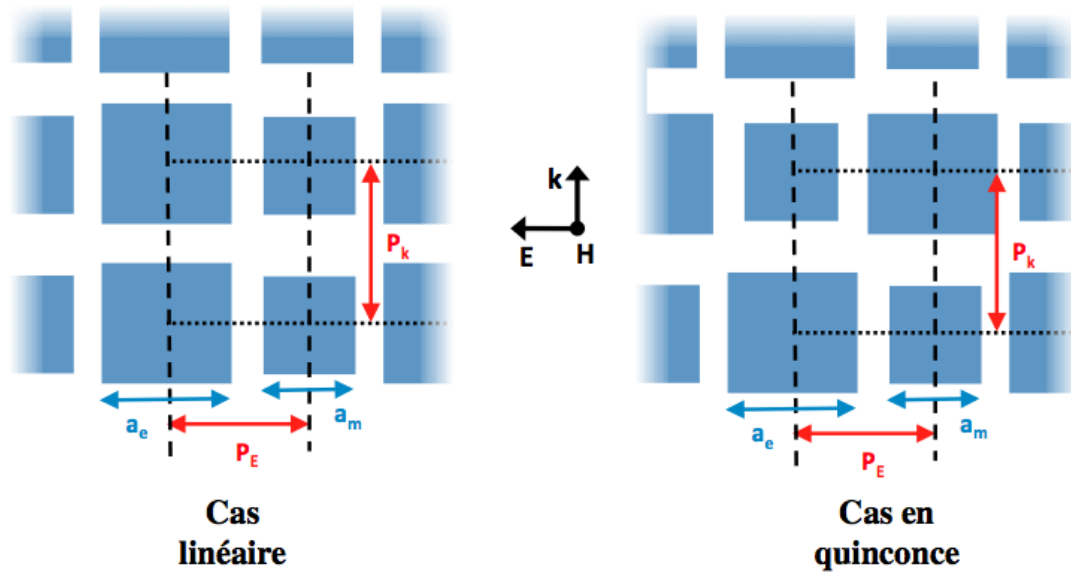


FIGURE IV.2.35 – Schéma de la disposition des résonateurs dans le cas linéaire (en haut) et le cas en quinconce (en bas). Si la maille du réseau est carrée alors le pas selon la direction  $\mathbf{k}$ , noté  $p_k$ , est le même que le pas dans la direction  $\mathbf{E}$ , noté  $p_E$ .

La superposition des deux modes est visible sur la figure IV.2.36, les résonateurs sont disposés en quinconce. On observe, encore une fois, une convergence de l'indice *effectif* à partir de 4 couches, avec malheureusement la disparition de la zone d'indice négatif. Il devient nécessaire, dans ces conditions, de jouer sur le couplage spatial ou fréquentiel pour espérer faire réapparaître cette zone d'indice négatif.

Nous ne sommes pas allé plus loin que 10 couches car au-delà les paramètres effectifs deviennent impossible à extraire autour de 370 GHz, en raison d'un couplage trop important. On le voit déjà sur le cas à 10 couches, les « crans » sont en réalité des artefacts de simulations, liés à l'impossibilité pour le code d'extraction de trouver la bonne branche de l'indice *effectif* autour de cette fréquence.

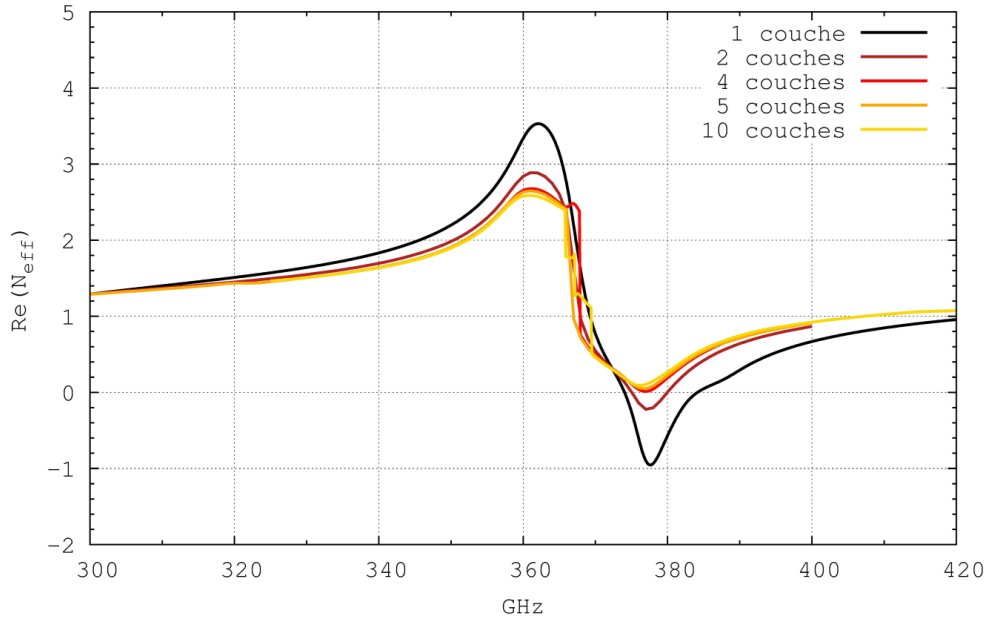


FIGURE IV.2.36 – Partie réelle de l'indice *effectif* en fonction du nombre de couches. Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 140 \mu\text{m}$  dans les directions  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{k}$  (maille carrée). Les résonateurs sont disposés en quinconce. Il y a une convergence de l'indice *effectif*, qui s'accompagne malheureusement de la disparition de la zone d'indice négatif. Les « crans » visibles pour 10 couches autour de 370 GHz sont des artefacts de simulations.

### 2.2.5 Structures 3D

Nous avons étudié la possibilité de fabriquer un ADM en trois dimensions avec ce type de diélectrique. Les premiers modes de résonance d'un cube de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ) de côté  $a = 90 \mu\text{m}$  se calculent par la formule (II.2.16) et leur fréquence sont :

- $\text{TE}_{111} = 288 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{112} = 408 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{221} = 500 \text{ GHz}$
- $\text{TE}_{113} = 552 \text{ GHz}$

Ceci nous permet de calibrer une cellule élémentaire d'un ADM composé de deux cubes de côtés  $a_m = 66 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ . La superposition des modes  $\text{TE}_{111}$  du premier et  $\text{TE}_{112}$  du deuxième permettent d'obtenir un indice *effectif* négatif vers 380 GHz, comme représenté sur la figure IV.2.37.

La subtilité réside dans la caractérisation du couplage, qui a lieu dans deux directions de l'espace et non une seule comme dans nos cas précédents. Comme nous sommes en polarisation TE, on peut définir un pas selon la direction de chaque champ, comme le représente la figure IV.2.38. Le pas selon la direction du champ  $\mathbf{E}$  (les pas  $p_1$  et  $p_2$  précédents étaient selon cette direction) est noté  $p_E$ , le pas selon la direction du champ  $\mathbf{H}$  est noté  $p_H$  et le pas selon la direction  $\mathbf{k}$  est noté  $p_k$ . Puisque toute notre étude sur les structures 3D est faite en monocouche, le pas  $p_k$  n'interviendra pas dans nos simulations.

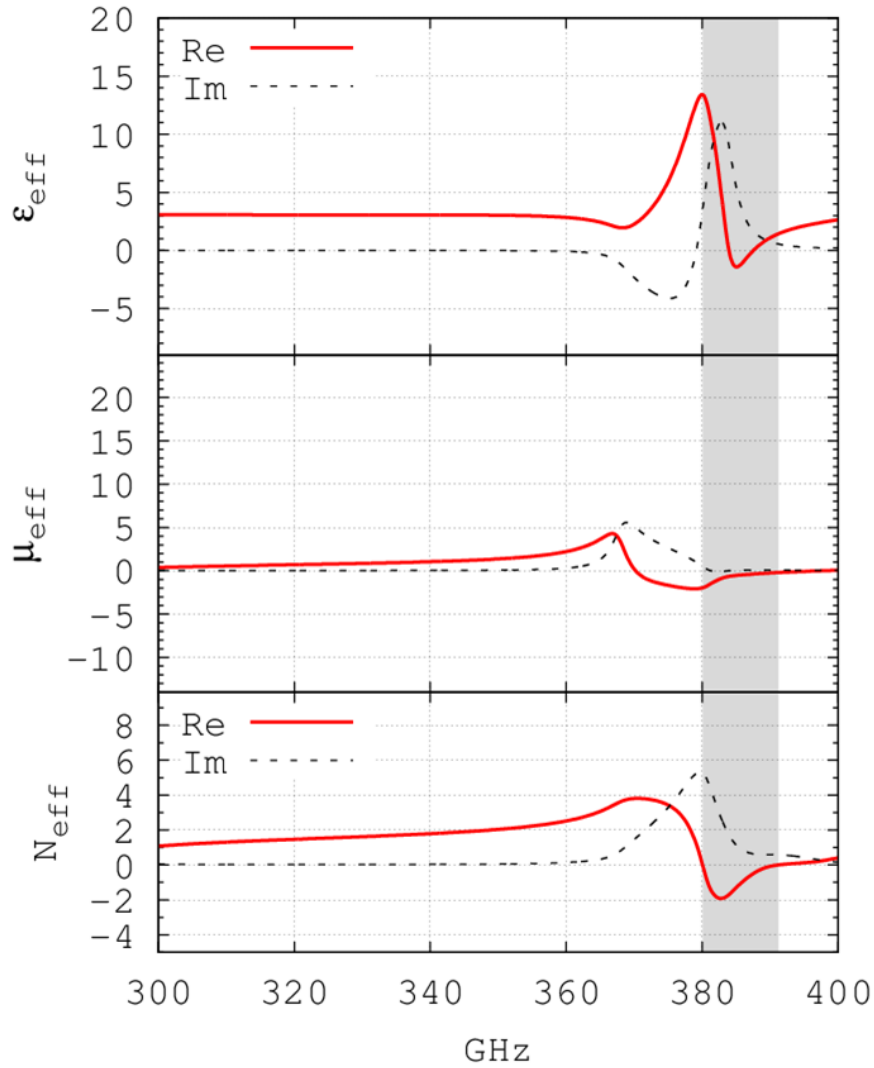


FIGURE IV.2.37 – Paramètres *effectifs* d'un ADM 3D dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$   $\tan \delta = 0,01$ ) de côtés  $a_m = 66 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ , avec  $p_E = p_H = 120 \mu\text{m}$ . On observe un indice *effectif* négatif vers 380 GHz, ayant pour minimum  $N_{\text{eff}} = -2$ .

Lorsque l'on s'intéresse au couplage spatial dans la direction  $\mathbf{E}$ , on obtient des figures similaires à la partie 2.2.1. La position en fréquence des paramètres S est visible sur la figure IV.2.39, tandis que la variation du minimum d'indice *effectif* est visible sur la figure IV.2.40.

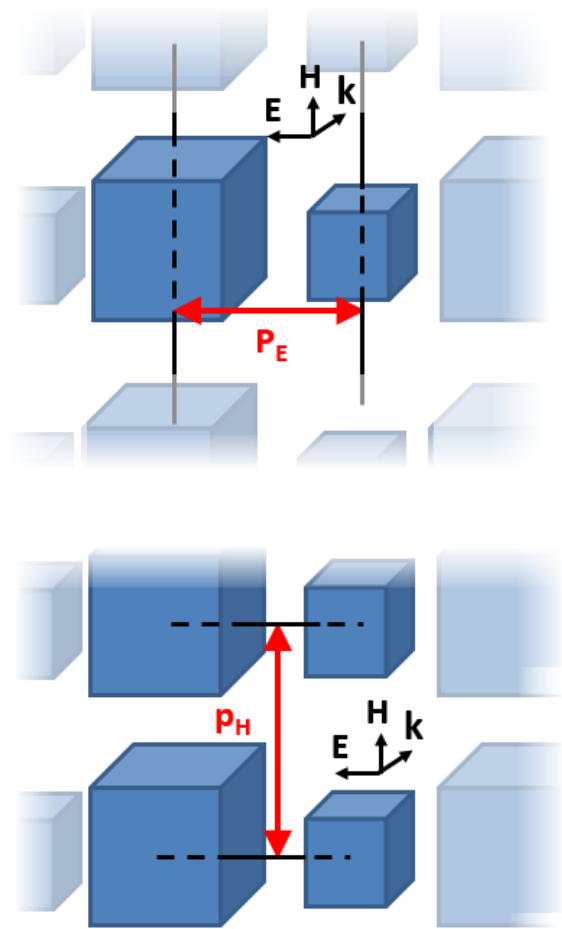


FIGURE IV.2.38 – Schéma de définition des pas  $p_E$  (en haut) et  $p_H$  (en bas) dans le cas d'un métamatériau 3D monocouche dont la cellule élémentaire est composée de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  de côtés  $a_m$  (petit cube) et  $a_e$  (grand cube).

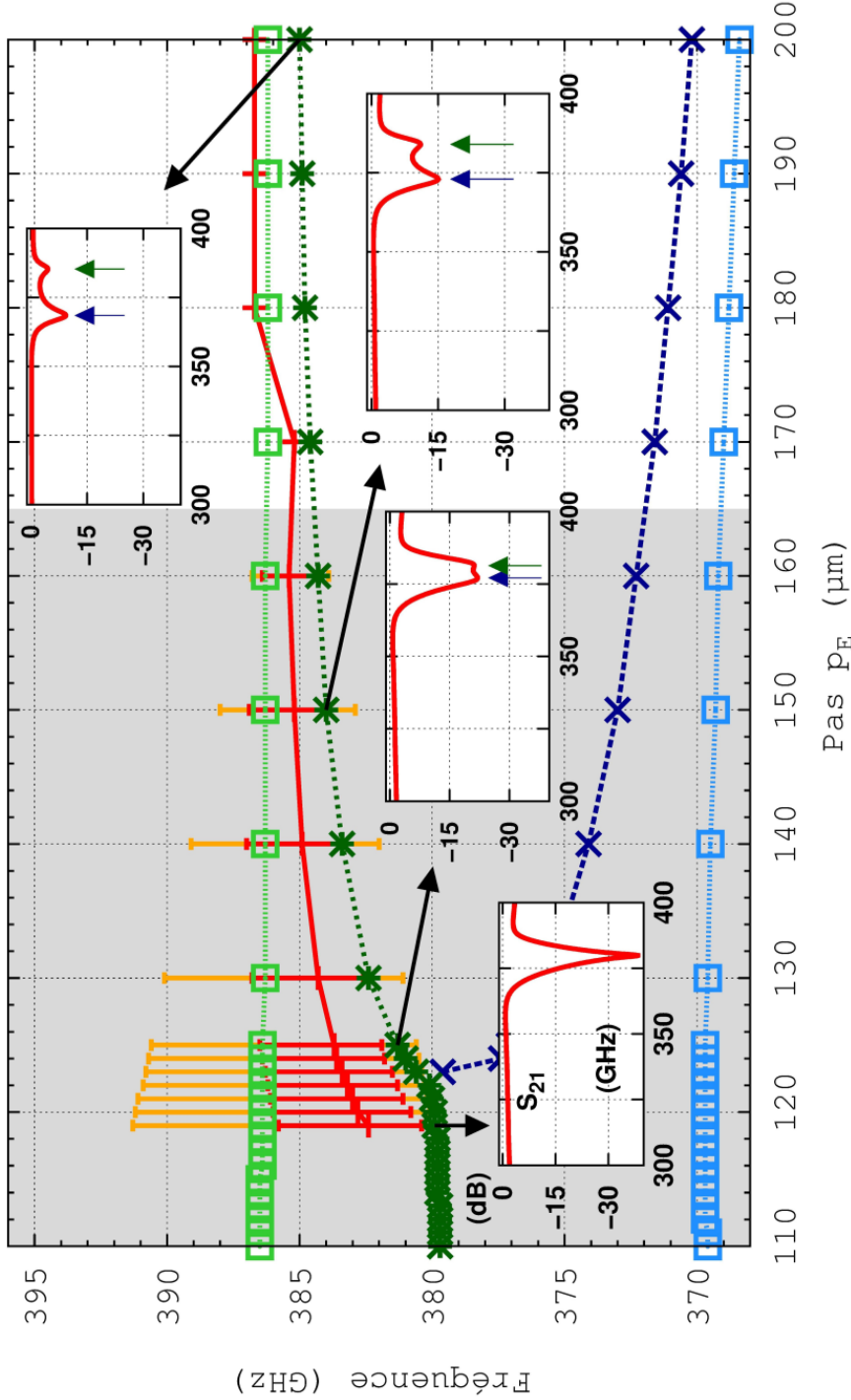


FIGURE IV.2.39 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice *effectif* (**rouge**) en fonction de  $p_E$ . Pour un ADM 3D dont la cellule élémentaire est composée de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  de côtés  $a_m = 66 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ , avec  $p_H = 120 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone où l'indice *effectif* est négatif. En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. On observe la même chose que pour la figure IV.2.26, avec deux régimes de couplage : un rapprochement des modes suivi d'une dégénérescence, qui se maintient.

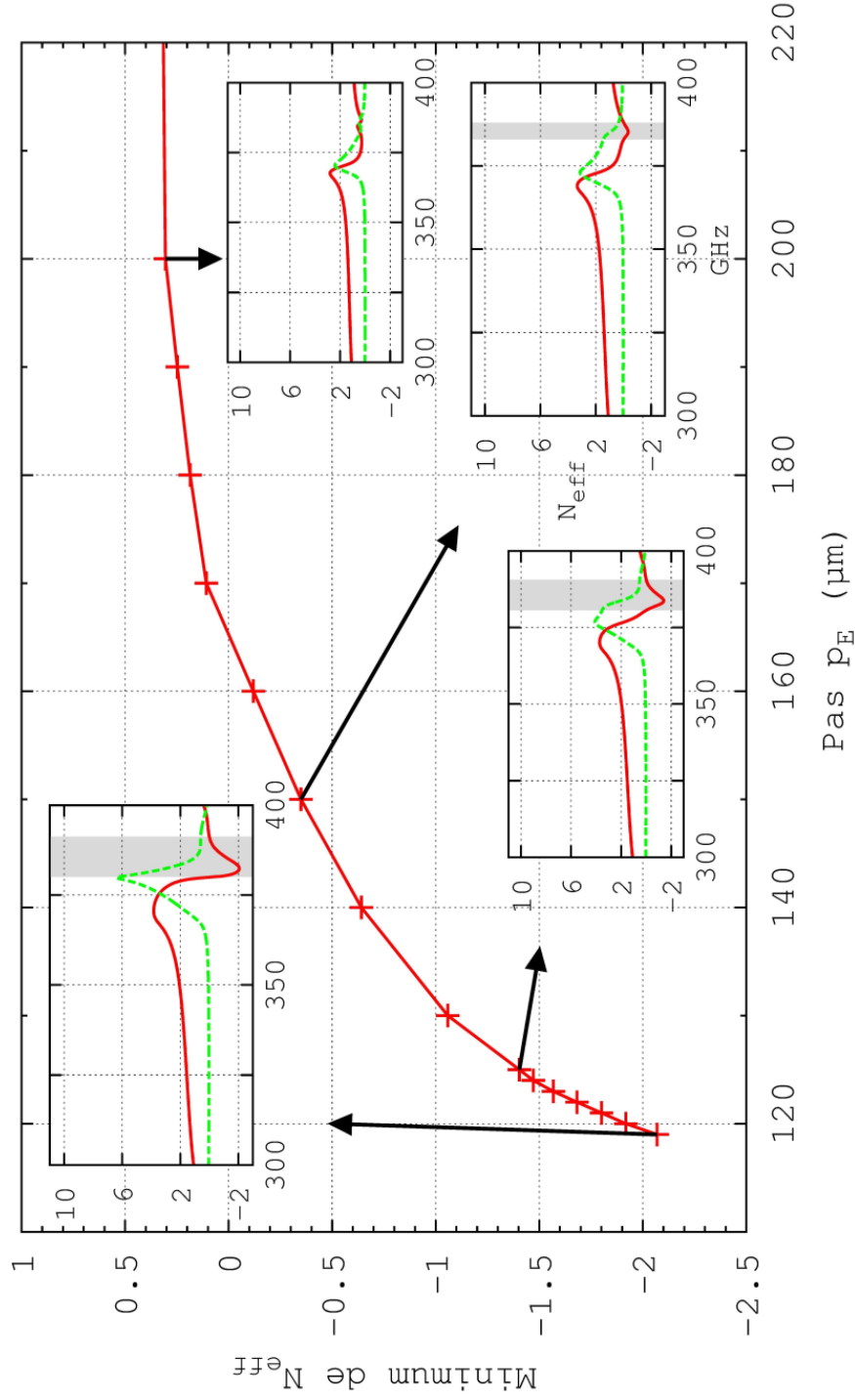


FIGURE IV.2.40 – Minimum d'indice *effectif* en fonction du pas  $p_E$  pour un ADM 3D dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100 \tan \delta = 0,01$ ) avec  $a_m = 66 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_H = 120 \mu\text{m}$ . En insertion, l'indice *effectif* en fonction de la fréquence pour respectivement  $p_E = 119, 125, 150$  et  $180 \mu\text{m}$ . La variation du minimum d'indice est similaire aux cas de la partie 2.2.3.



Le comportement est très différent lorsque l'on s'intéresse au pas  $p_H$ . La figure IV.2.41 montre l'équivalent de la figure IV.2.39 mais pour  $p_E = 150 \mu\text{m}$  et un pas  $p_H$  variable. Dans cette configuration, on n'observe pas de variation de mode dans des directions contraires : le mode électrique comme le mode magnétique diminuent en fréquence lorsque  $p_H$  diminue. Il n'y a pas de recouvrement des modes électrique et magnétique également, même pour un pas très faible. Le couplage spatial selon  $p_H$  est donc complètement différent du couplage spatial selon  $p_E$ .

Comme précédemment, la figure IV.2.42 montre l'équivalent de la figure IV.2.40, mais pour  $p_E = 150 \mu\text{m}$  et un pas  $p_H$  variable. Encore une fois, le comportement est très différent : le minimum d'indice semble avoir deux minima, l'un pour un pas  $p_H$  très faible, l'autre pour un pas intermédiaire, vers  $150 \mu\text{m}$ .

Une première interprétation serait de dire qu'il y a au moins deux facteurs responsables de sa diminution, l'un ayant plus d'effet que l'autre selon la position. Il faudrait donc trouver un moyen de distinguer ces deux contributions, si elles existent.

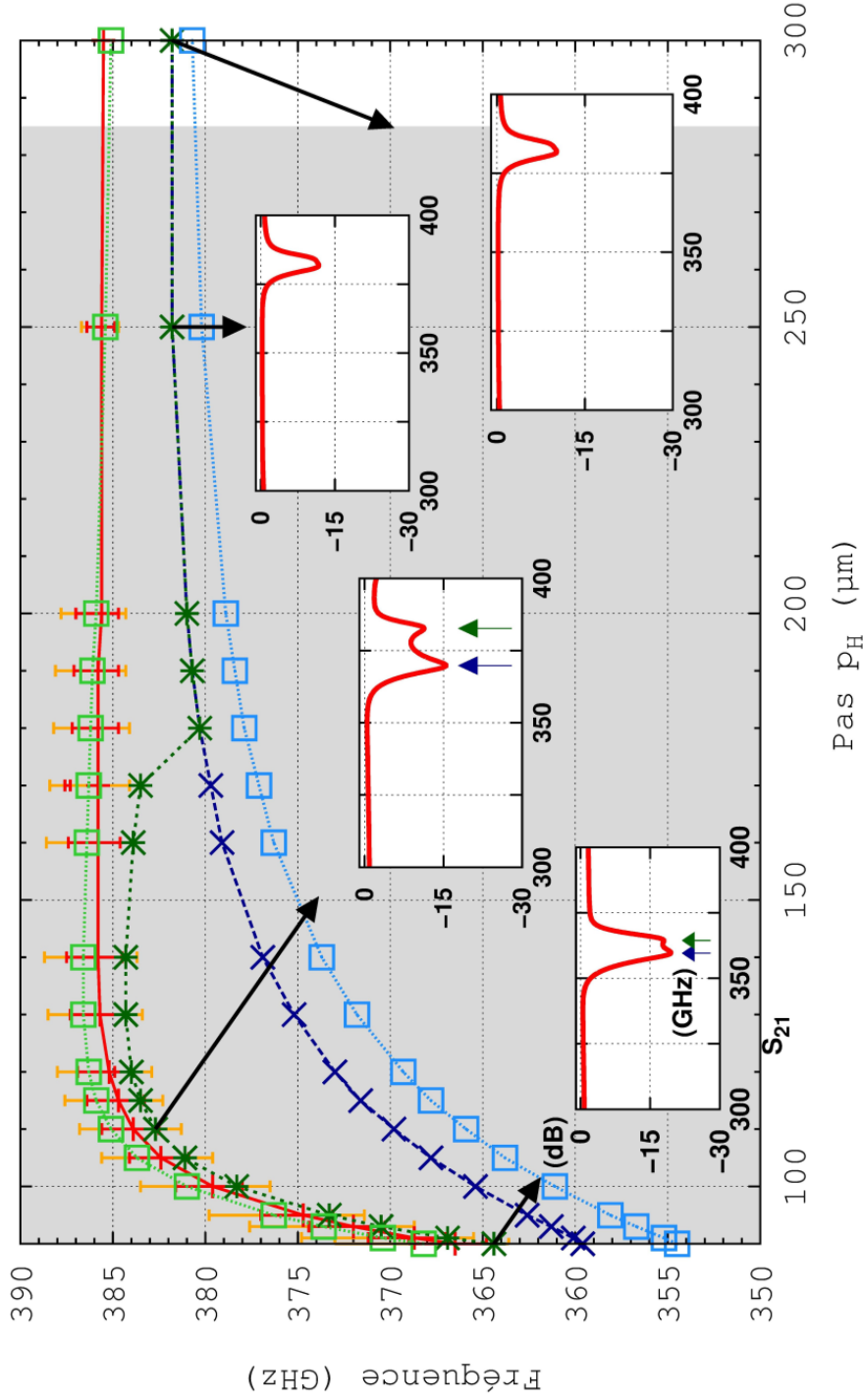


FIGURE IV.2.41 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice effectif (**rouge**) en fonction de  $p_H$ . Pour un ADM 3D dont la cellule élémentaire est composée de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_m = 66 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_E = 150 \mu\text{m}$ . En insertion, la transmission  $S_{21}$  en dB à des fréquences particulières. Le comportement des paramètres  $S$  est différent de toutes les observations précédentes : il n'y a ni variation de mode dans des directions contraires, ni dégénérescence de mode pour un pas très faible.

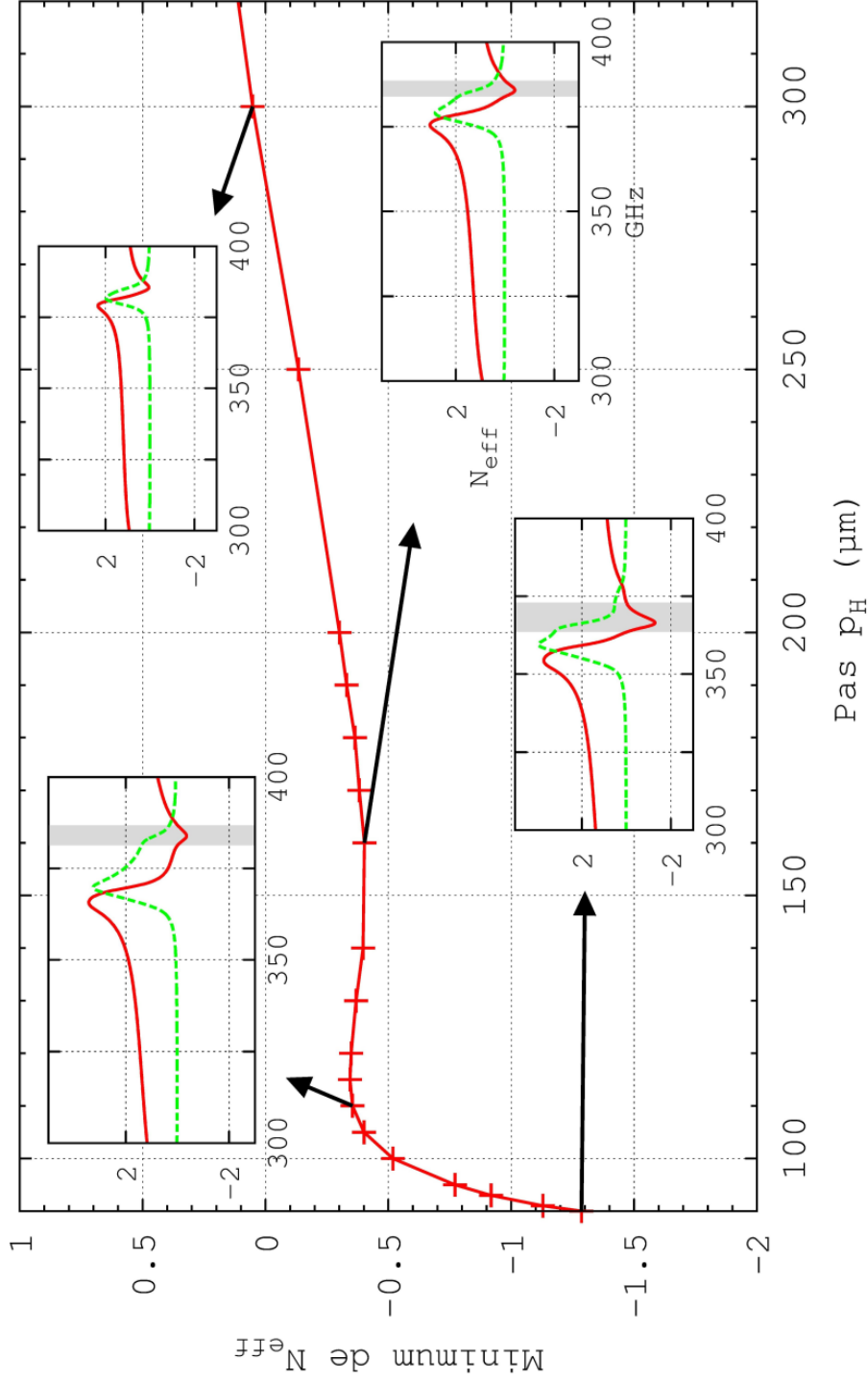


FIGURE IV.2.42 – Minimum d'indice *effective* en fonction du pas  $p_H$  pour un ADM 3D dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cubes de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 100$ ,  $\tan \delta = 0,01$ ) avec  $a_m = 66 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_E = 150 \mu\text{m}$ . La variation du minimum d'indice est différente de toutes les observations précédentes : le minimum d'indice semble avoir deux minima, l'un pour un pas  $p_H$  très faible, l'autre pour un pas intermédiaire, vers  $150 \mu\text{m}$ .

### 2.2.6 Effet du milieu hôte

Nous en avons parlé en introduction, le milieu hôte, plus précisément sa permittivité relative  $\epsilon_r$ , a un effet non négligeable sur les paramètres effectifs. Elle joue en effet sur le contraste d'indice, et permet, nous le verrons, d'améliorer le couplage inter-résonateur, et donc la zone d'indice *effectif* négatif.

Premièrement, prenons un cas simple, avec un couplage suffisamment fort pour permettre un indice négatif, le cas où  $p_2 = 130 \mu\text{m}$  sur la figure IV.2.26, avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$  et  $a_e = 90 \mu\text{m}$ , en monocouche, où l'air est le milieu hôte ( $\epsilon_r = 1$ ). Dans cette configuration, les paramètres effectifs sont tracés à gauche sur la figure IV.2.43. De manière purement théorique (la valeur ne correspond pas forcément à un matériau existant), nous plaçons ces mêmes résonateurs dans un milieu hôte de  $140 \mu\text{m}$  d'épaisseur et de permittivité relative  $\epsilon_r = 1,1$ . La différence est minime avec la permittivité relative de l'air mais ce simple changement permet de voir déjà une nette différence dans les paramètres effectifs du métamatériau, à droite sur la figure IV.2.43.

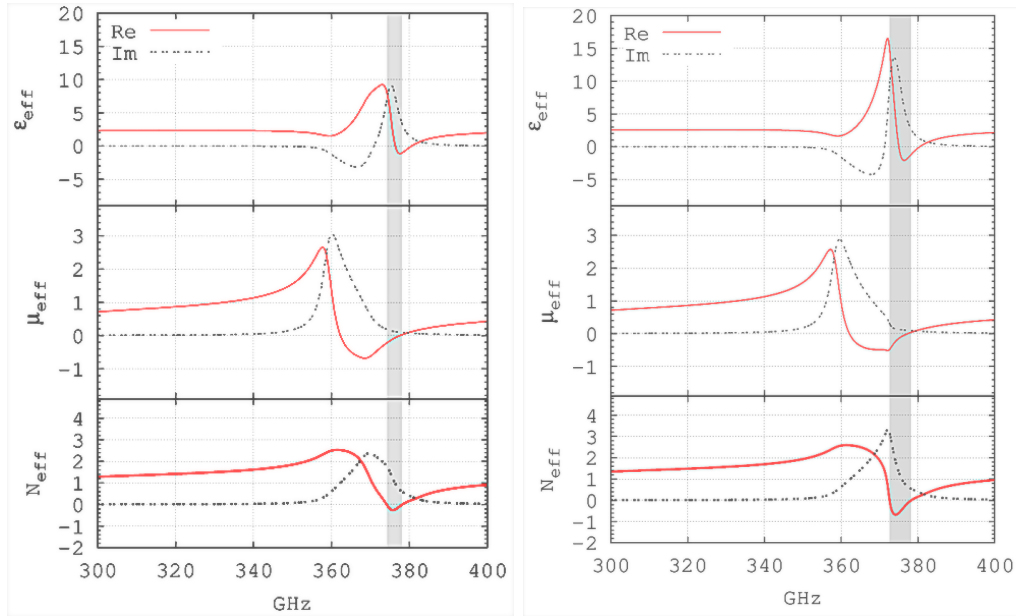


FIGURE IV.2.43 – Paramètres *effectifs* d'un ADM en fonction du milieu hôte. La cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 94$   $\tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 130 \mu\text{m}$ . Le milieu hôte à gauche a une permittivité relative  $\epsilon_r$  de 1 (de l'air), et à droite une permittivité  $\epsilon_r = 1,1$  sur une épaisseur de  $140 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice négatif. On constate une augmentation de l'amplitude de la résonance électrique, un élargissement de la zone de perméabilité *effective* négative, et donc un léger élargissement de la zone d'indice négatif, avec une diminution de son minimum.

Afin de mieux comprendre ce qu'il se passe il nous faut observer le comportement des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$ . Nous prenons un cas différent, où ces mêmes résonateurs sont placés entre un milieu hôte de  $90 \mu\text{m}$  d'épaisseur et dont la permittivité relative est plus importante ( $\epsilon_r = 3,4$ ), les effets seront ainsi plus visibles. Nous nous plaçons à un pas  $p_2 = 180 \mu\text{m}$ , les paramètres effectifs associés sont visibles sur la figure IV.2.44.

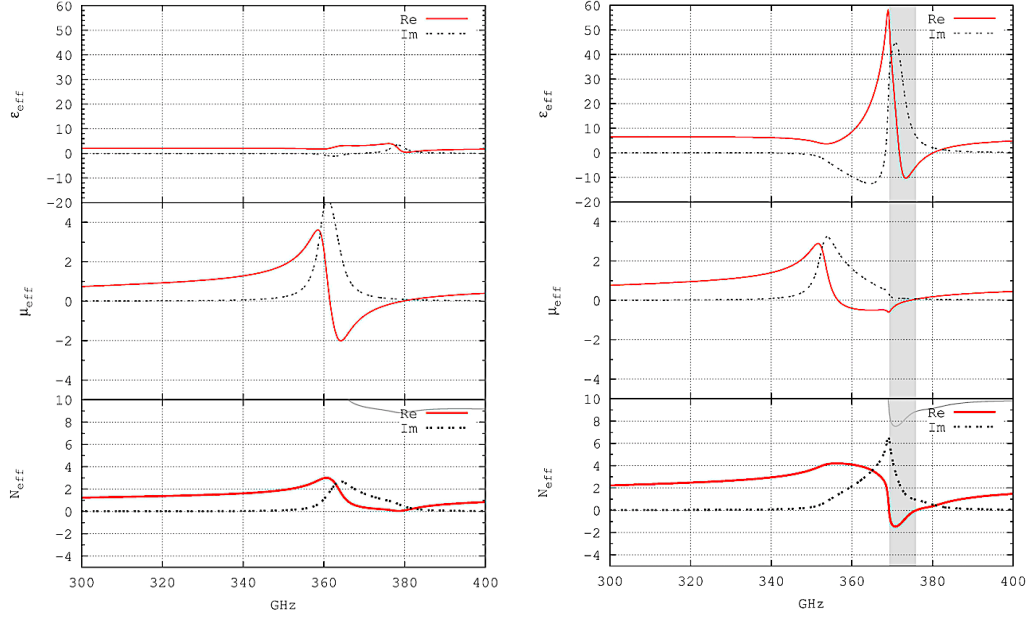


FIGURE IV.2.44 – Paramètres *effectifs* d'un ADM en fonction du milieu hôte. La cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 94$   $\tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 180 \mu\text{m}$ . Le milieu hôte à gauche a une permittivité relative  $\epsilon_r$  de 1 (de l'air), et à droite une permittivité  $\epsilon_r = 3,4$  sur une épaisseur de  $90 \mu\text{m}$ . La zone grisée correspond à la zone d'indice négatif. En l'absence de milieu hôte, les résonances ne permettent pas un indice *effectif* négatif, la permittivité *effective* est d'ailleurs strictement positive. En présence du milieu hôte l'amplitude de la résonance électrique s'amplifie d'un facteur 10 et la permittivité *effective* devient négative. La résonance magnétique au contraire se retrouve légèrement écrasée et la zone de perméabilité négative diminue. Cela n'empêche cependant pas un indice *effectif* négatif d'apparaître, vers 370 GHz, avec une valeur minimale importante de  $N_{eff} = -1,5$ .

L'effet est encore plus marqué que sur la figure IV.2.43. En l'absence de milieu hôte, les résonances ne permettent pas un indice *effectif* négatif, la permittivité *effective* est d'ailleurs strictement positive. En présence du milieu hôte de permittivité  $\epsilon_r = 3,4$  l'amplitude de la résonance électrique se trouve considérablement amplifiée (le maximum de la partie réelle est multiplié par 10) et la permittivité *effective* devient négative. La résonance magnétique au contraire se retrouve légèrement écrasée (le maximum de la partie réelle passe de 3,5 à moins de 3) et la zone de perméabilité négative se retrouve aussi réduite. Cela n'empêche cependant pas un indice *effectif* négatif d'apparaître, vers 370 GHz, avec une valeur minimale  $N_{eff} = -1,5$  environ, ce qui est très important pour nos ADM.

Lorsqu'on s'intéresse aux cartographies des champs électriques et magnétiques aux deux minima de l'indice *effectif*, visibles sur la figure IV.2.44, soit à 378,5 GHz pour le cas sans milieu hôte et à 370,8 GHz pour le cas avec le milieu hôte de permittivité  $\epsilon_r = 3,4$ , la différence est nette, on le voit sur la figure IV.2.45. On remarque premièrement que l'intensité du champ  $\mathbf{H}$  est plus faible à l'intérieur des résonateurs en présence du milieu hôte, avec deuxièmement un champ  $\mathbf{E}$  beaucoup moins localisé autour des cylindres et au contraire plus étalé dans l'espace qui les sépare, avec une légère baisse de

son intensité maximale. Ceci illustre un couplage plus important entre les résonateurs en présence d'un milieu hôte, favorable visiblement à l'obtention d'un indice *effectif* négatif.

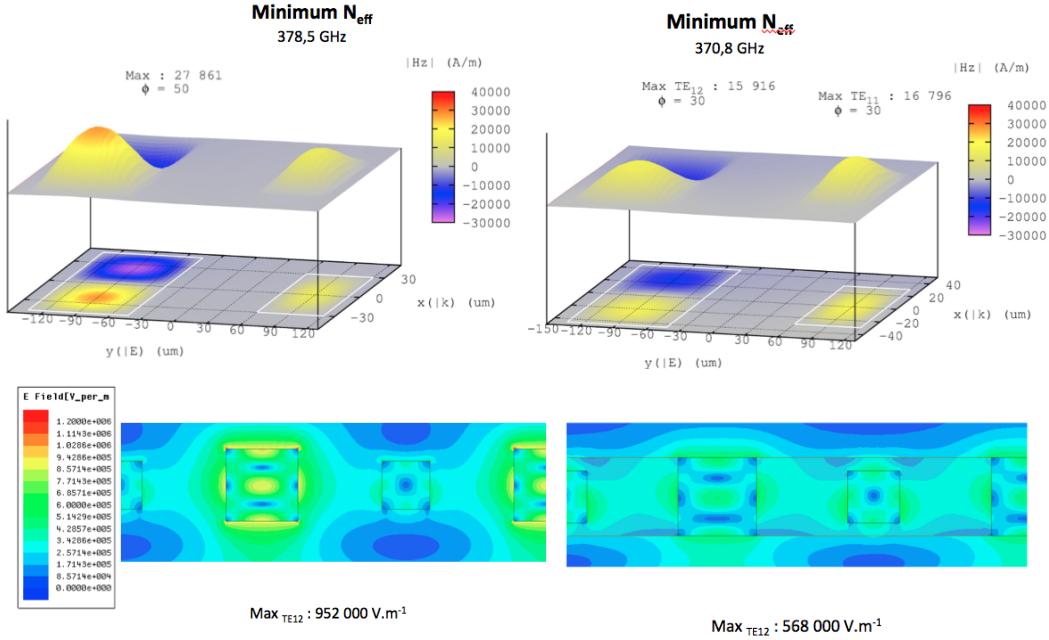


FIGURE IV.2.45 – Effet du milieu hôte sur l'amplitude du champ  $\mathbf{H}$  (en haut) et du champ  $\mathbf{E}$  (en bas) d'un ADM. La cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 60 \mu\text{m}$ ,  $a_e = 90 \mu\text{m}$  et  $p_2 = 180 \mu\text{m}$  lorsqu'on est au minimum de l'indice *effectif*. A gauche, il n'y a pas de milieu hôte, à droite le milieu hôte ( $\epsilon_r = 3,4$ ) est entre les cylindres et fait  $90 \mu\text{m}$  d'épaisseur. On remarque que l'intensité du champ  $\mathbf{H}$  est plus faible à l'intérieur des résonateurs en présence du milieu hôte, avec un champ  $\mathbf{E}$  beaucoup moins localisé autour des cylindres mais au contraire plus étalé entre eux, avec une légère baisse sur l'intensité maximale. Ceci illustre un couplage plus important entre les résonateurs en présence d'un milieu hôte.

Le milieu hôte a donc un rôle primordial dans nos applications. La compréhension précise de son rôle sur le couplage entre les résonances électrique et magnétique n'a pas été beaucoup plus exploré que ce qui est présenté ici, néanmoins il est un paramètre important à prendre en compte pour l'amélioration des dispositifs à indice *effectif* négatif au térahertz. Il pourrait permettre, par exemple, de travailler avec un pas plus important, et donc avec des cellules élémentaires plus faciles à fabriquer.

### 2.3 TEMEX Ceramics

La possibilité de se procurer un résonateur diélectrique auprès d'un professionnel du secteur a été évoqué dans le cadre de cette thèse, c'est pourquoi des simulations ont été faites à partir des caractéristiques de la série de résonateurs E4000 de l'entreprise TEMEX<sup>12</sup>. Cette série de résonateurs diélectriques possède une permittivité  $\epsilon_r$  d'environ 30 (soit très en-dessous de nos critères fixés au chapitre III) mais en revanche un facteur de qualité  $Q$  de 15 000 à 10 GHz, soit une tangente de perte inférieure à  $1.10^{-5}$  vers 350 GHz. Nous avons donc utilisé ces valeurs pour étudier la possibilité d'un indice *effectif* négatif avec ce diélectrique. Les deux premiers modes de résonances de Mie de cylindres 2D à section carrée composés de céramique E4000 sont visibles sur la figure IV.2.46. Leur section a été calculée pour que les deux résonances soient placées dans la même gamme de fréquence, toujours sur le même principe que la figure IV.1.2 (écart de 6 % environ entre les résonances).

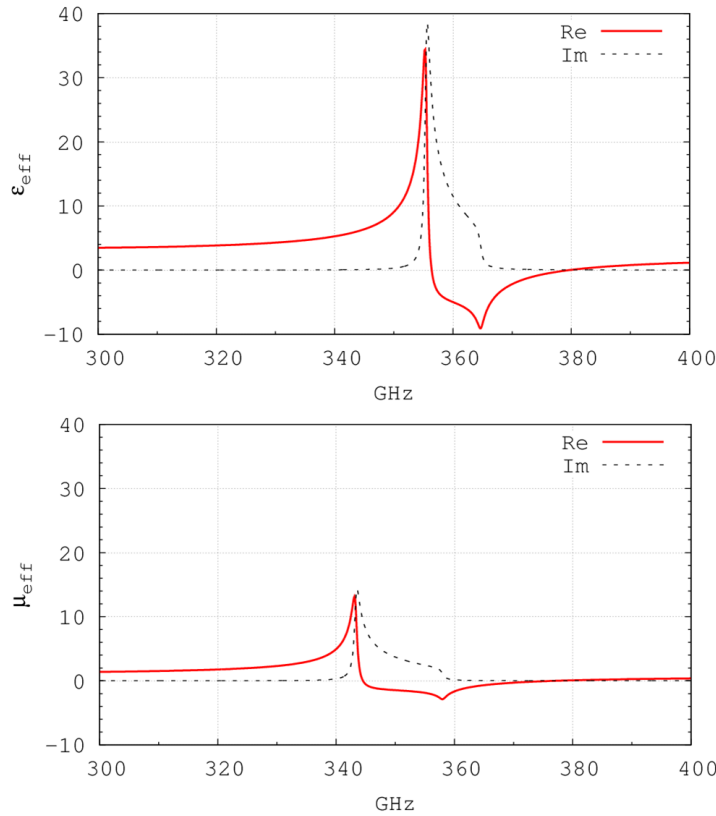


FIGURE IV.2.46 – Permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$  pour deux ADM à partir de céramiques TEMEX. La cellule élémentaire est un cylindre 2D à section carrée composé de céramique E4000 de l'entreprise TEMEX ( $\epsilon_r = 30$   $\tan \delta = 1.10^{-5}$ ). En haut, le mode  $TE_{12}$  d'un résonateur de côté  $a_e = 160 \mu\text{m}$ . En bas, le mode  $TE_{11}$  d'un résonateur de côté  $a_m = 110 \mu\text{m}$ . Dans les deux cas  $p_2 = 310 \mu\text{m}$ . On observe une partie réelle négative dans les deux cas sur une gamme de fréquence similaire et très étendue.

12. [http://www.exxelia.com/wp-content/uploads/pdf/Produits\\_hyperfrequence/E4000\\_Series.pdf](http://www.exxelia.com/wp-content/uploads/pdf/Produits_hyperfrequence/E4000_Series.pdf)

La superposition de ces deux modes, de la même manière que sur la figure IV.1.2, nous permet d'avoir un indice *effectif* négatif  $N_{eff} = -1,2$  dans la gamme [360 ; 364,5] GHz comme le montre la figure IV.2.47. Néanmoins, cet indice a le désavantage d'être lié principalement à la très forte permittivité *effective* négative de la résonance électrique  $TE_{12}$ . En effet, on le voit, la perméabilité *effective* n'est quasiment pas négative. Cette différence importante entre  $\epsilon_{eff}$  et  $\mu_{eff}$  entrainera une impédance *effective*  $Z_{eff}$  très éloignée de l'unité<sup>13</sup>, ce qui rendra toute application pratique quasiment impossible, du moins dans cette configuration-là. Pour cette raison, même sans tenir compte de la permittivité trop faible, ce matériau n'a pas été exploré outre mesure. Le choix pour nos matériaux d'une permittivité relative suffisamment élevée se justifie ici pleinement.

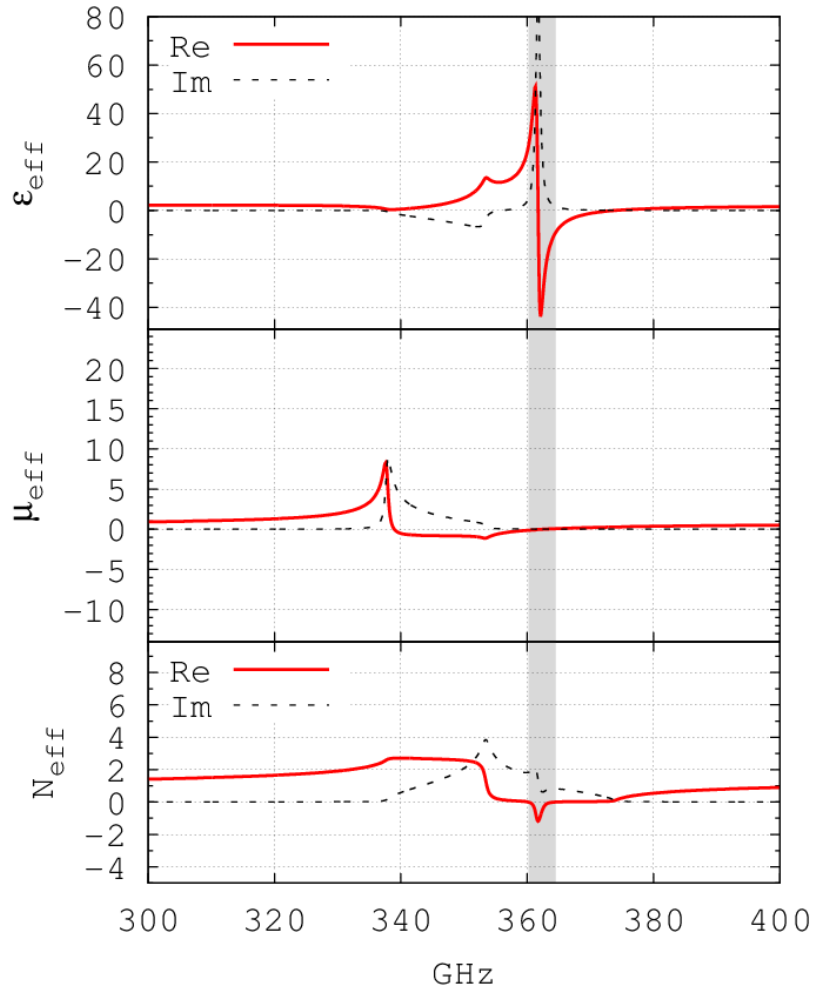


FIGURE IV.2.47 – Paramètres effectifs d'un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D à section carrée, à base de céramique E4000 de l'entreprise Temex ( $\epsilon_r = 30$   $\tan \delta = 1.10^{-5}$ ), avec  $a_m = 110 \mu m$ ,  $a_e = 160 \mu m$  et  $p_2 = 310 \mu m$ . L'indice *effectif* est négatif sur la gamme [360 ; 364,5] GHz et son minimum vaut  $N_{eff} = -1,2$ . En revanche,  $\epsilon_{eff}$  et  $\mu_{eff}$  sont trop différents dans cette gamme de fréquence pour espérer une application pratique ( $Z_{eff} \ll 1$ ), c'est pourquoi ce matériau n'a pas été plus étudié.

13. Pour rappel, l'impédance est liée à la permittivité et la perméabilité par la relation :  $Z = \sqrt{\mu/\epsilon}$



### 3 Métamatériaux tout-diélectrique aux micro-ondes

#### 3.1 $\text{TiO}_2$

Suite aux avancées intéressantes dans le domaine térahertz avec le  $\text{TiO}_2$ , la possibilité de l'utiliser aux fréquences micro-ondes a été envisagée par les membres du projet, et a été étudiée. Il fallait voir, en premier lieu, si un indice *effectif* négatif était également possible à ces fréquences avec ce matériau, et en second lieu vérifier si les phénomènes de couplage observés précédemment se vérifient toujours. La cellule élémentaire aux fréquences micro-ondes est représentée sur la figure IV.3.1. Elle est composée de deux cylindres 2D à section carrée, la permittivité relative à ces fréquences est  $\epsilon_r = 92$  et la tangente de perte vaut  $\tan \delta = 0,01$ . Pour se retrouver de la figure IV.1.2 de référence, les dimensions des résonateurs magnétiques et électriques sont respectivement  $a_m = 2,2$  mm,  $a_e = 3,3$  mm.

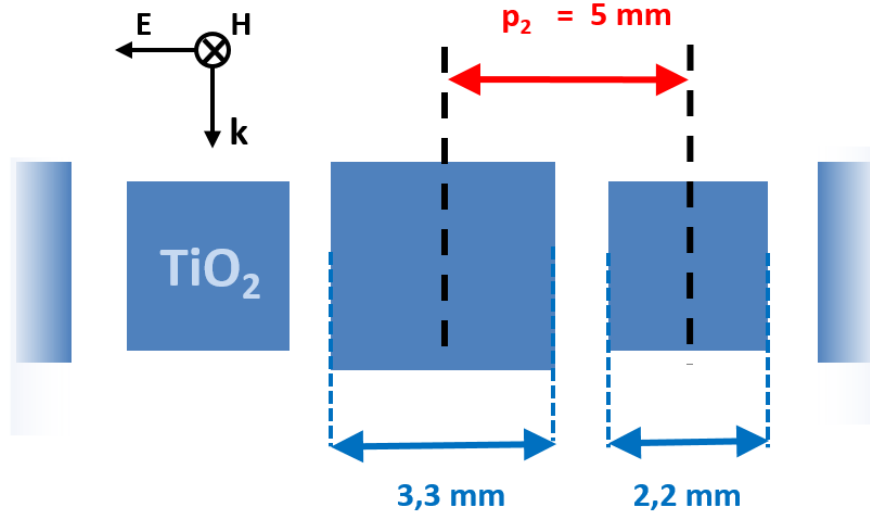


FIGURE IV.3.1 – Représentation schématique de la cellule élémentaire d'un ADM composé de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 92$   $\tan \delta = 0,01$ ) aux fréquences micro-ondes. Les cylindres sont de section carrée avec  $a_m = 2,2$  mm et  $a_e = 3,3$  mm. Un pas  $p_2 = 5$  mm permet d'avoir un indice *effectif* négatif, celui-ci est visible sur la figure IV.3.2 suivante.

Pour un pas  $p_2 = 5$  mm, un indice *effectif* négatif est possible, on le voit sur la figure IV.3.2, la permittivité *effective* comme la perméabilité présentent une partie réelle négative, bien que cette dernière soit relativement faible dans la zone d'indice négatif. Le minimum d'indice vaut  $N_{eff} = -1,5$  environ, à 10,5 GHz, il est possible de l'améliorer en jouant sur le couplage spatial ou fréquentiel.

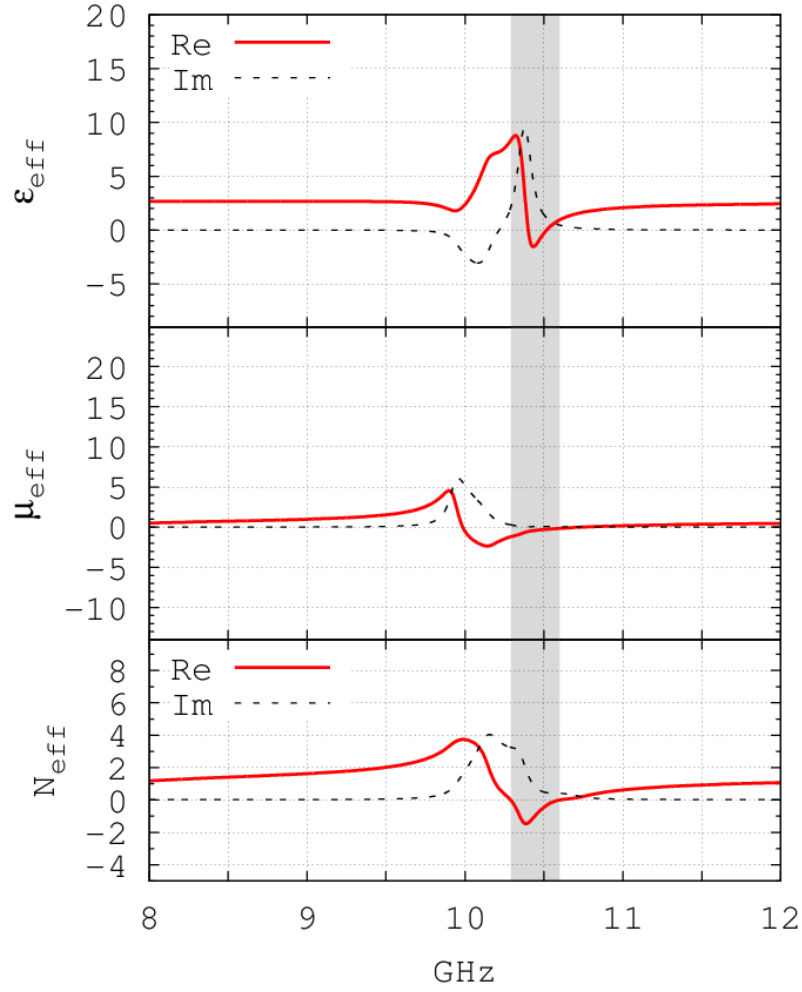


FIGURE IV.3.2 – Paramètres *effectifs* d'un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  ( $\epsilon_r = 92$   $\tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, avec  $a_m = 2,2$  mm,  $a_e = 3,3$  mm, et  $p_2 = 5$  mm. On observe un indice *effectif* négatif vers 10 GHz, son minimum vaut  $N_{\text{eff}} = -1,5$ .

L'étude du couplage spatial donne également des résultats similaires à ceux de la partie 2.2 consacrée au  $\text{TiO}_2$  dans la gamme térahertz. Sur la figure IV.3.3 on s'intéresse au couplage spatial de chaque résonateur indépendamment, le mode  $\text{TE}_{11}$  d'un côté et le mode  $\text{TE}_{12}$  de l'autre. on observe un comportement identique à ceux de la figure IV.2.25, c'est-à-dire une augmentation en fréquence du minimum de transmission avec le couplage dans le premier cas, et une baisse dans le second.

Lorsque ces deux modes sont présents dans la même gamme de fréquence, le couplage spatial est encore une fois particulier. Il n'est pas simplement le résultat de la superposition de ces deux figures. Les résonances, repérées par le minimum de transmission, ne font pas que se rapprocher, on observe encore une fois dégénérescence des modes, qui se maintient si on continue à diminuer le pas.

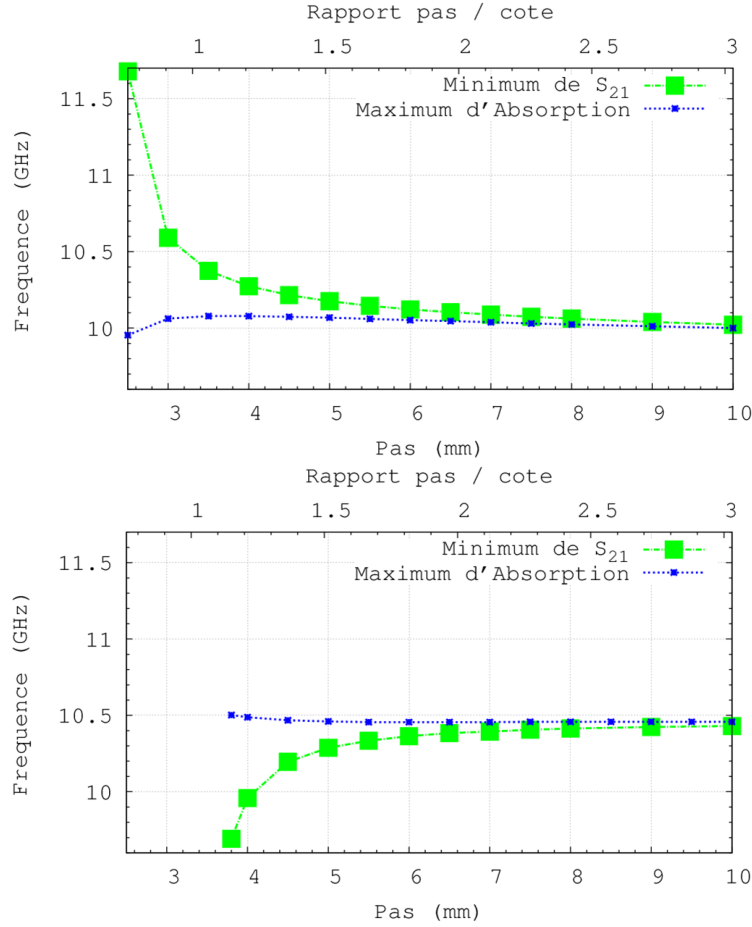


FIGURE IV.3.3 – Minimum de transmission  $S_{21}$  (en vert) et maximum d'absorption (en bleu) pour chaque mode de résonance en fonction du couplage spatial. En haut, le mode magnétique  $TE_{11}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_m = 2,2$  mm. En bas, le mode électrique  $TE_{12}$  pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée d'un cylindre 2D de  $\text{TiO}_2$  avec  $a_e = 3,3$  mm. Comme pour la figure IV.2.25, seul le minimum de la transmission  $S_{21}$  permet d'observer le couplage entre les résonateurs, le maximum d'absorption ne le permet pas [150]. La formule du résonateur isolé (II.2.18) nous donne  $TE_{11} = 10,05$  GHz et  $TE_{12} = 10,60$  GHz, ce qui correspond bien aux valeurs asymptotiques de chaque figure.

Encore une fois, pour un couplage spatial entre les modes électrique et magnétique, on retrouve le même type de couplage que sur la figure IV.2.26, le résultat est visible sur la figure IV.3.4, celui-ci montre clairement deux régimes, l'un où les résonances se rapprochent, et l'autre avec la dégénérescence de modes, une fois la bande de résonance atteinte. Cette dégénérescence s'accompagne d'une chute importante de la transmission  $S_{21}$ , comme on le voit sur la première figure en insertion.

Ce couplage spatial permet d'abaisser le minimum de l'indice *effectif* négatif. On le voit sur la figure IV.3.5, juste avant la bande de résonance ce dernier atteint la valeur limite  $N_{eff} = -2,2$ .

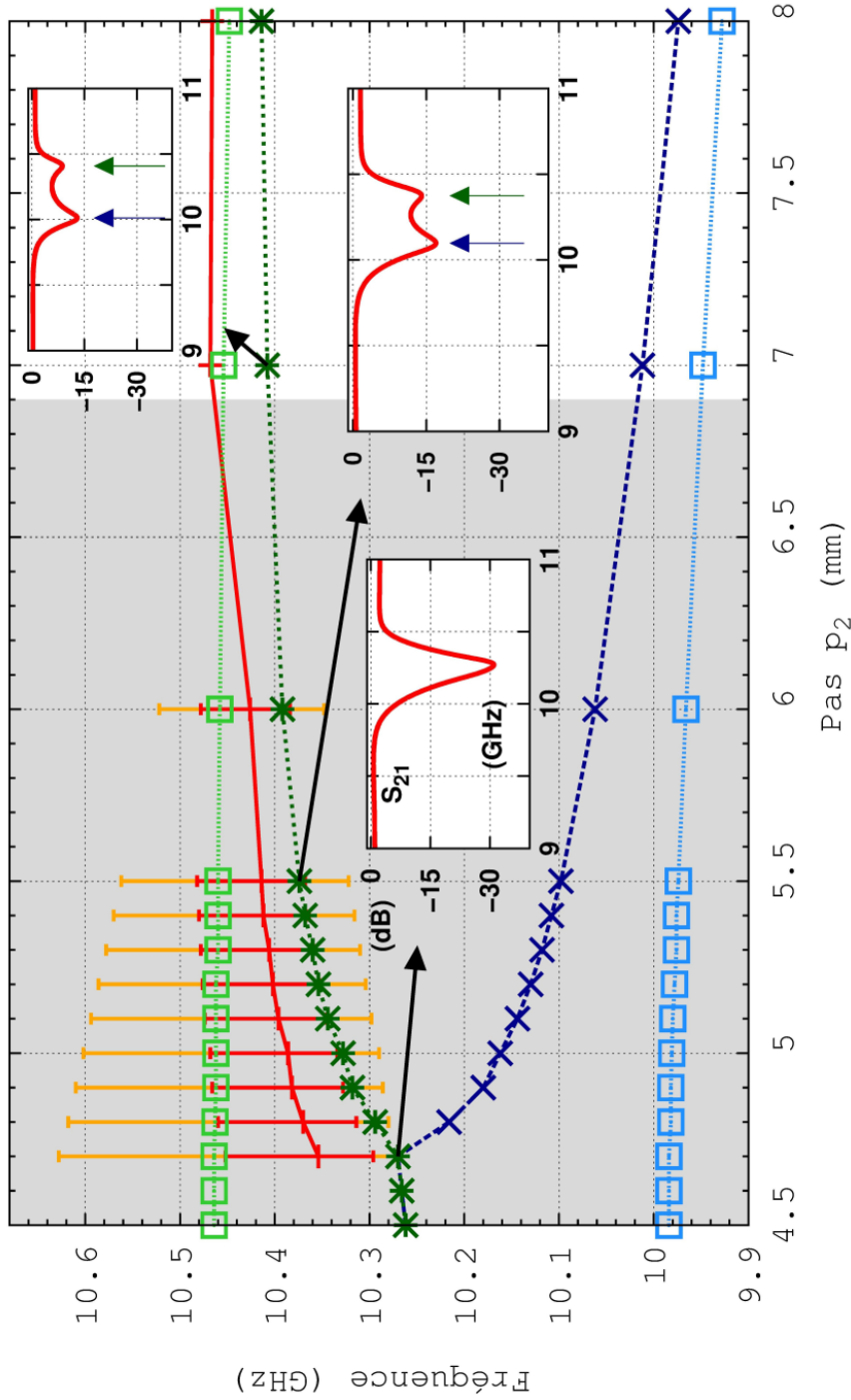


FIGURE IV.3.4 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice *effectif* (**rouge**) en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de  $\text{TiO}_2$  de section carrée avec  $a_m = 2.2$  mm et  $a_e = 3.3$  mm. La zone grisée correspond à la zone d'indice *effectif* négatif observé. En insertion, la transmission  $S_{21}$  en dB à des pas  $p_2$  particuliers. On observe comme pour la figure IV.2.26 deux régimes, l'un où les résonances se rapprochent, et l'autre avec une dégénérescence de modes, une fois la bande de résonance atteinte. Cette dégénérescence s'accompagne d'une chute importante de la transmission  $S_{21}$ , comme on le voit sur la première figure en insertion.

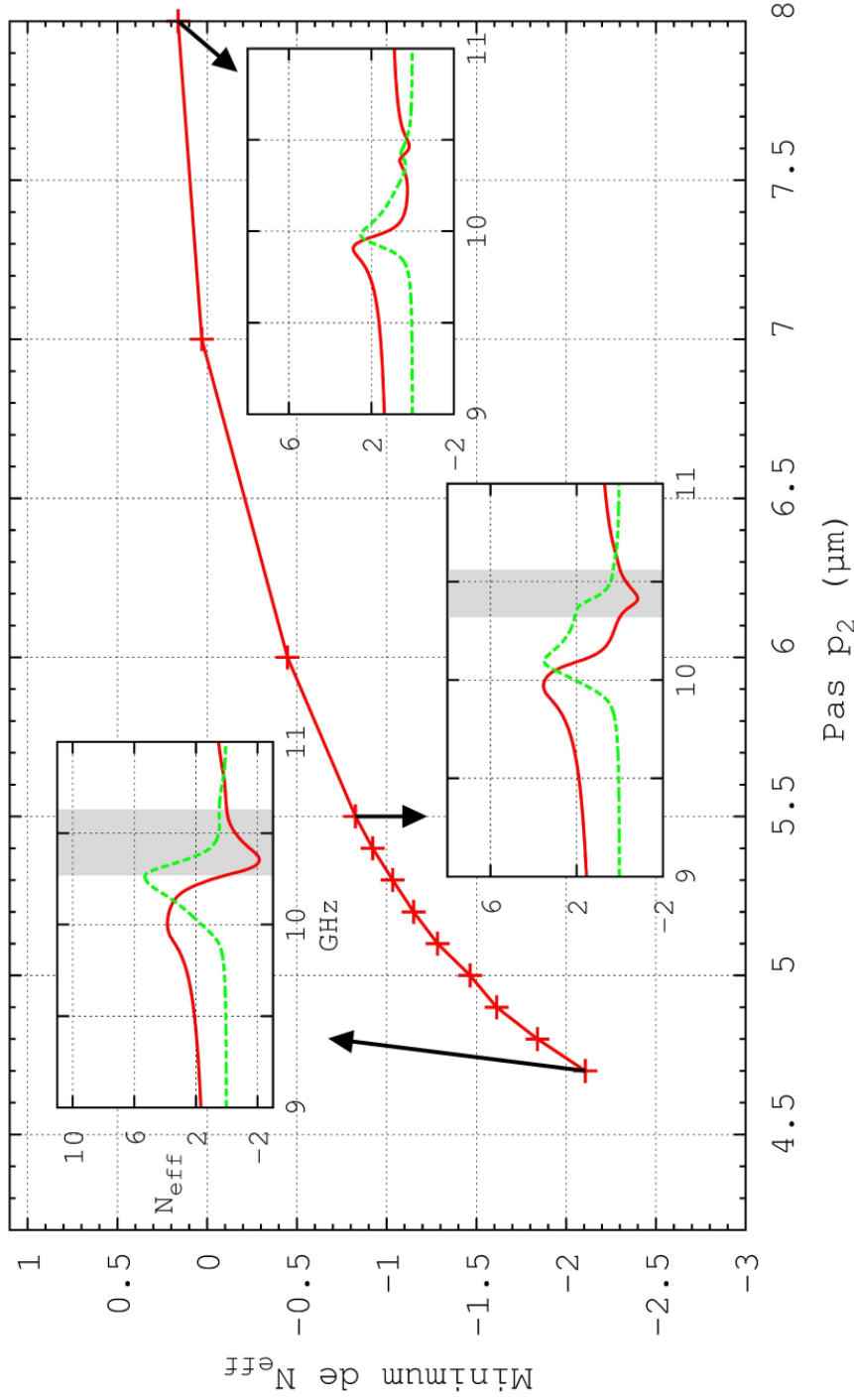


FIGURE IV.3.5 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de  $TiO_2$  ( $\epsilon_r = 92 \tan \delta = 0,01$ ) à section carrée, avec  $a_m = 2,2$  mm,  $a_e = 3,3$  mm. On observe une diminution progressive de l'indice *effectif* lorsque le pas diminue, jusqu'à atteindre une valeur minimale  $N_{eff} = -2,2$  juste avant la bande de résonance.

### 3.2 $SrTiO_3$

La cellule élémentaire aux fréquences micro-ondes est représentée sur la figure IV.3.6. Elle est composée de deux cylindres 2D à section carrée, la permittivité relative à ces fréquences est  $\epsilon_r = 323$  et la tangente de perte vaut  $\tan \delta = 0,001$ . Pour se retrouver dans les conditions similaires à la figure IV.1.2, les dimensions des résonateurs magnétiques et électriques sont respectivement  $a_m = 1,2$  mm,  $a_e = 1,8$  mm.

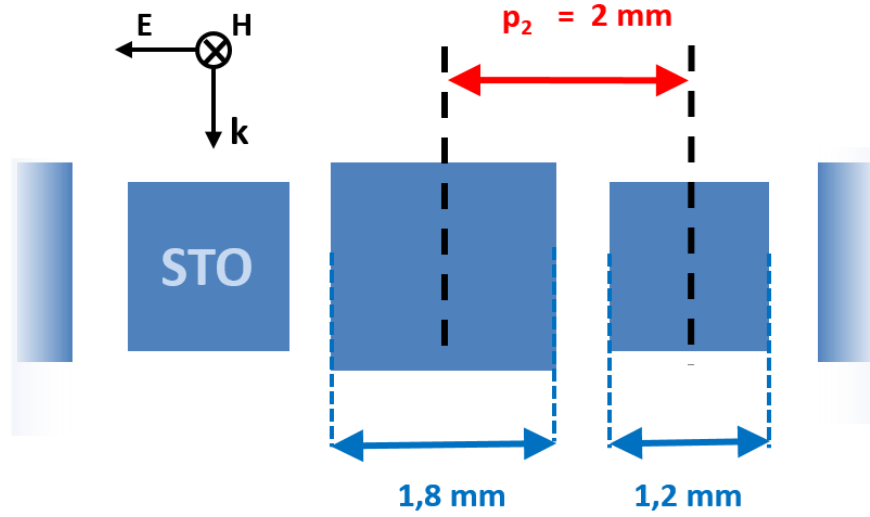


FIGURE IV.3.6 – Représentation schématique de la cellule élémentaire d'un ADM composé de STO ( $\epsilon_r = 323$   $\tan \delta = 0,001$ ) aux fréquences micro-ondes. Les cylindres sont de section carrée avec  $a_m = 1,2$  mm,  $a_e = 1,8$  mm et  $p_2 = 2$  mm. Un indice *effectif* négatif est possible, il est tracé sur la figure IV.3.7.

Pour un pas  $p_2 = 2$  mm, un indice *effectif* négatif est possible, on le voit sur la figure IV.3.7, la permittivité *effective* comme la perméabilité *effective* présentent une partie réelle négative, bien que cette dernière soit relativement faible. Le minimum d'indice vaut  $N_{eff} = -5,7$  à 10,3 GHz et il est possible de l'améliorer en jouant sur le couplage spatial ou fréquentiel.

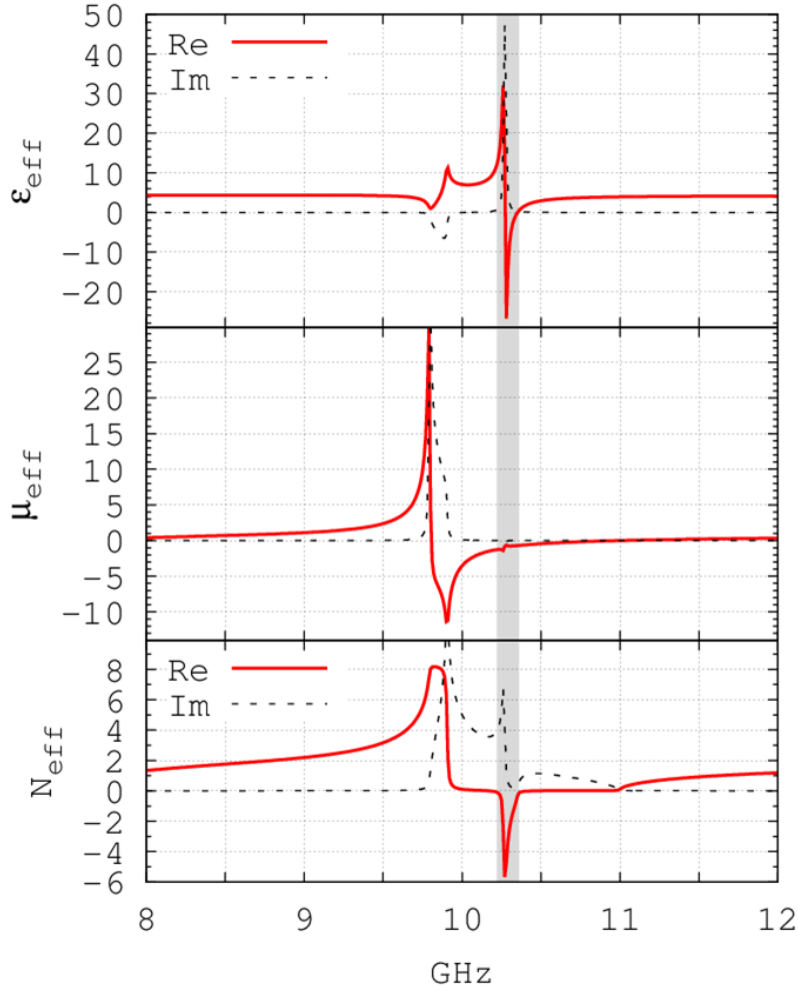


FIGURE IV.3.7 – Paramètres *effectifs* d'un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO ( $\epsilon_r = 323$   $\tan \delta = 0,001$ ) à section carrée, avec  $a_m = 1,2$  mm,  $a_e = 1,8$  mm, et  $p_2 = 2$  mm. La zone grisée correspond à la zone d'indice négatif, respectant la condition de Depine *et al.* [149]. On observe un indice *effectif* négatif vers 10,4 GHz, son minimum vaut  $N_{eff} = -6$  environ, ce qui est très important.

L'étude du couplage spatial donne des résultats similaires à ceux de la partie 2.2 consacrée au  $\text{TiO}_2$  dans la gamme térahertz. Sur la figure IV.3.8 on s'intéresse au couplage spatial entre les deux résonateurs, l'un dans le mode  $\text{TE}_{11}$  et l'autre dans le mode  $\text{TE}_{12}$ . On observe, comme sur la figure IV.2.26, deux régimes de couplage, l'un où les résonances se rapprochent, et l'autre avec une dégénérescence de modes. Cette dégénérescence s'accompagne d'une chute importante de la transmission  $S_{21}$ , on le voit sur la première figure en insertion.

Ce couplage spatial permet d'abaisser le minimum de l'indice *effectif* négatif. La figure IV.3.9 représente le minimum d'indice, juste avant la bande de résonance ce dernier atteint la valeur limite  $N_{eff} = -7,7$ . Il est surprenant de noter que l'indice *effectif* reste négatif sur une très large gamme.

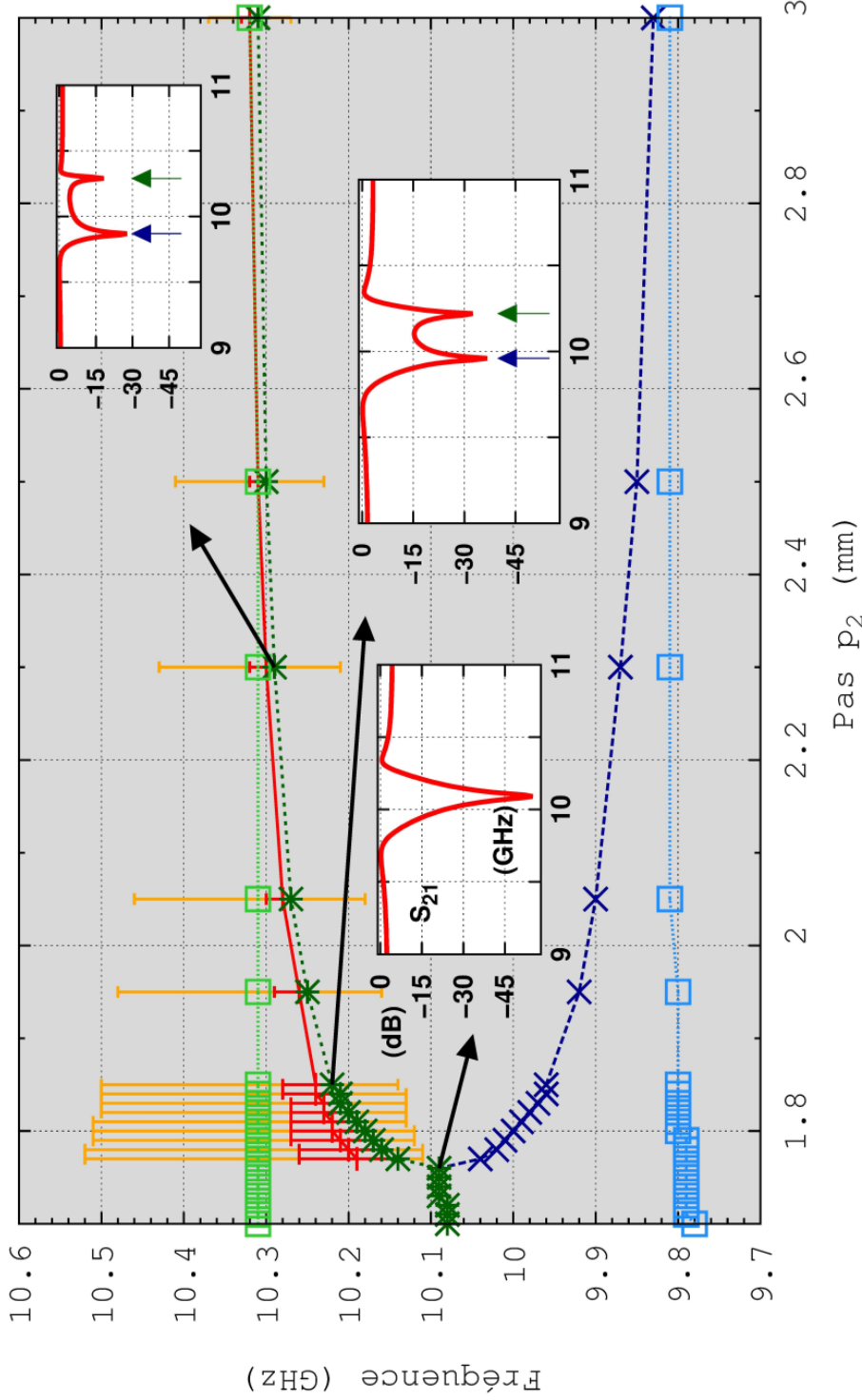


FIGURE IV.3.8 – Minimum de transmission ( $S_{21}$ ) et maximum d'absorption pour le mode électrique (respectivement **vert foncé** et **vert clair**) et le mode magnétique (respectivement **bleu foncé** et **bleu clair**) ainsi que le minimum de l'indice *effectif* (**rouge**) en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est composée de deux cylindres 2D de STO de section carrée avec  $a_m = 1,2$  mm et  $a_e = 1,8$  mm. La zone grisée correspond à la zone où l'indice *effectif* est négatif (c'est donc tout le temps négatif sur les limites choisies). En insert, la transmission  $S_{21}$  en dB à des  $p_2$  particuliers. On observe, comme sur la figure IV.2.26, deux régimes de couplage, l'un où les résonances se rapprochent, et l'autre avec une dégénérescence de modes.



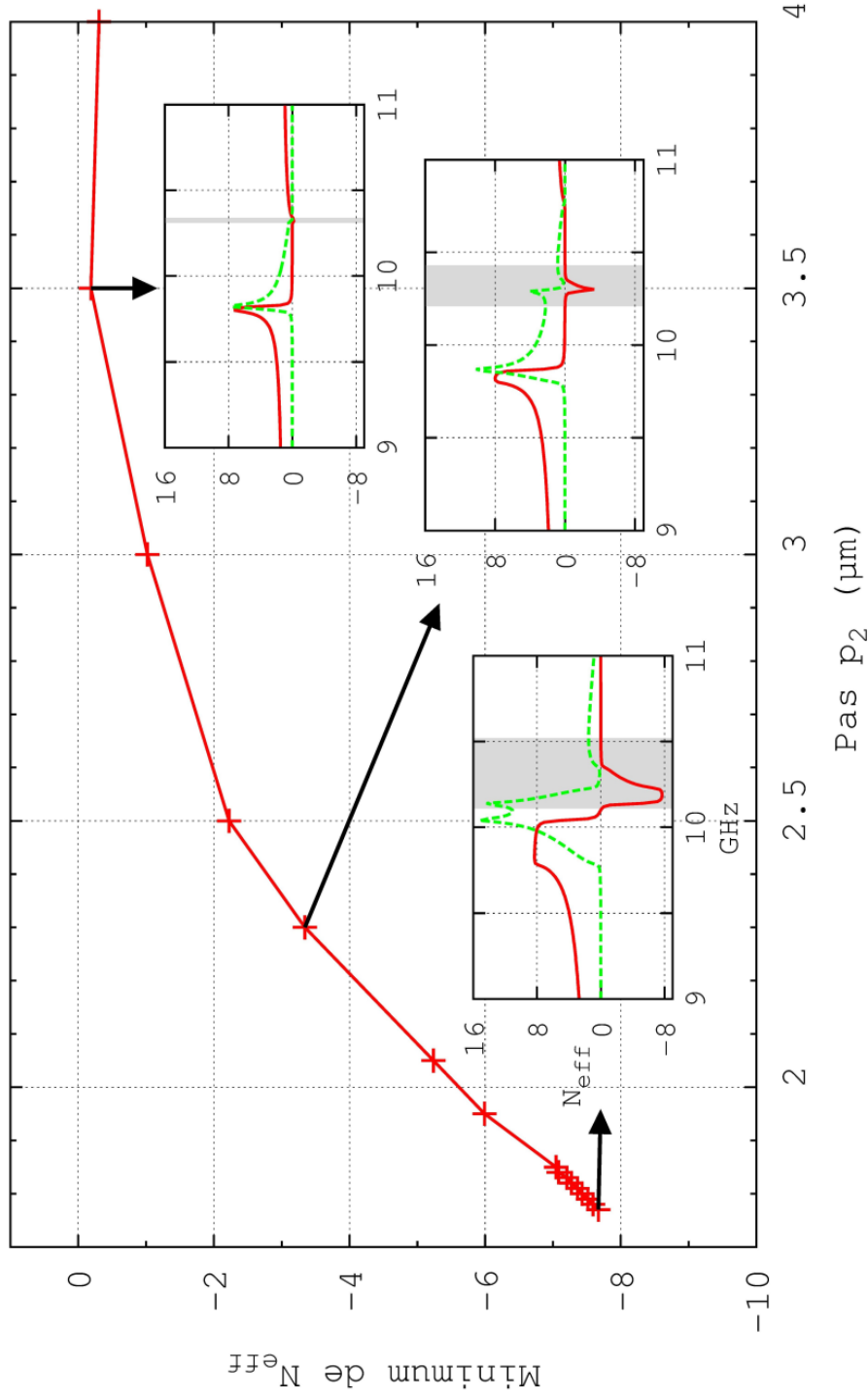


FIGURE IV.3.9 – Minimum de l'indice *effectif* en fonction du pas  $p_2$ . Pour un ADM dont la cellule élémentaire est un jeu de deux cylindres 2D de STO ( $\epsilon_r = 323 \tan \delta = 0,001$ ) à section carrée, avec  $a_m = 1,2$  mm,  $a_e = 1,8$  mm. Il est surprenant de noter que l'indice *effectif* reste négatif sur une très large gamme. On observe comme précédemment une diminution progressive de l'indice *effectif* lorsque le pas diminue, jusqu'à atteindre un minimum  $N_{eff} = -7,7$ , cette limite marque le début de la bande de résonance.

## 4 Perspectives

Beaucoup de points restent encore à explorer avec les métamatériaux tout-diélectrique étudiés dans le cadre de cette thèse. On peut en lister quelques-uns, du plus important au moins important :

- Pour commencer, au niveau des simulations, en raison de la priorité donnée aux dispositifs 2D, les cas 3D monocouche et multicouches ont été peu explorés. Ils restent pourtant les cas les plus intéressants puisqu'ils ouvrent la voie à des dispositifs isotropes, et dans une moindre mesure une possibilité de faire des ADM « volumiques » au THz. Une meilleure compréhension des mécanismes en jeu dans la partie 2.2.5, particulièrement en ce qui concerne le couplage spatial dans la direction  $\mathbf{H}$ , mérite d'être explorée.
- Deuxièmement, le cas d'un ADM isotrope n'a pas été du tout étudié. La conception de dispositifs à base de sphères diélectriques est certainement la meilleure solution pour y parvenir. Cela a d'ailleurs déjà été fait à haute fréquence [34, 42, 46].
- Nous ne sommes pas montés assez haut dans la gamme térahertz. Comme décrits dans la partie 2, la présence des phonons optiques est une première barrière pour nos applications, en plus du problème de miniaturisation. Il n'est cependant pas impossible d'atteindre des fréquences de 1 ou 2 THz (voire plus) avec ce type de diélectriques. Le temps nous a manqué pour le faire.
- La conception (et la réalisation) d'un prisme à base d'ADM au térahertz a été simplement évoqué mais pas exploré. Quelques simulations ont été faites, non présentées dans le manuscrit. Un tel dispositif représente pourtant la meilleure manière de vérifier la présence d'un milieu d'indice *effectif* négatif.
- D'un point de vue plus fondamental, la pleine compréhension du phénomène de dégénérescence observé en cas de fort couplage, que ce dernier soit spatial ou fréquentiel, mérite une investigation accrue afin de réellement comprendre les phénomènes physiques mis en jeu.
- De manière prospective, il aurait été intéressant de faire une étude en incidence oblique, pour voir l'effet sur l'indice négatif. Celle-ci nécessite au préalable une révision du code d'extraction, puisque qu'il n'est en effet valide qu'en incidence normale.

## 5 Conclusion

Au cours de cette thèse, nous avons vu qu'il était possible de réaliser des méta-matériaux « tout diélectrique » dans le but d'obtenir un indice *effectif* négatif. Leur utilisation est possible au gigahertz [31, 39, 45] comme à très haute fréquence, jusqu'à l'optique [36, 66]. Néanmoins, la gamme térahertz restait peu explorée jusqu'à maintenant. Cette thèse a permis de mieux comprendre les raisons principales de cette relative absence : présence des phonons optiques, pertes importantes et croissantes dans cette gamme, limites liées au dimensionnement des structures, etc. Malgré ces limites rapidement identifiées, nous avons réussi à observer un indice *effectif* négatif au térahertz, avec au moins deux types de céramique : le  $\text{SrTiO}_3$  et le  $\text{TiO}_2$ . Chacune d'elle a fait l'objet d'une étude approfondie, ce chapitre a permis d'en faire l'inventaire le plus précisément possible.

Cette étude nous a permis de mieux cerner le phénomène de couplage mis en jeu, et son importance dans les structures diélectriques. La fabrication d'un ADM nécessite en effet de prendre en compte un grand nombre de paramètres, autres que la simple géométrie des résonateurs ; il faut tenir compte également de la périodicité, du nombre de couches, de la présence ou non d'un milieu hôte, etc. ce qu'à l'heure actuelle aucun modèle théorique ne décrit complètement. Ces paramètres ont pourtant un rôle parfois primordial dans l'obtention d'un indice *effectif* négatif au térahertz et ne doivent pas être négligés ou ignorés, les résultats présentés dans ce chapitre l'illustrent bien.

Nous pouvons regretter les nombreux problèmes lors des étapes de fabrication et de caractérisation, nous ayant empêché de réaliser complètement un ADM au térahertz comme aux fréquences micro-ondes. Néanmoins, la réalisation de mesures expérimentales à partir des dispositifs présentés n'est une limite que dans le cadre de cette thèse, et l'avenir permettra sans aucun doute de confirmer certains résultats de simulations précédents.





# Conclusion générale

On peut terminer cette thèse en revenant au début de celle-ci, et en reprenant son intitulé : « Métamatériaux tout-diélectrique pour le térahertz ». D'une certaine manière, on remarque la structure suivante.

Le premier chapitre de cette thèse permet de comprendre le premier terme. Il définit ce que sont les métamatériaux en remontant à leur genèse et en déroulant progressivement les avancées expérimentales et théoriques importantes à leur sujet. Il montre dans un second temps quatre applications importantes des métamatériaux, expliquant ainsi l'engouement croissant de ces quinze dernières années à leur sujet.

Le deuxième chapitre permet de comprendre le deuxième terme. On voit ce que sont les diélectriques, ce qu'est un résonateur diélectrique, et en quoi des résonateurs diélectriques, via les résonances de Mie, permettent d'obtenir des paramètres effectifs négatifs. Les premiers métamatériaux étaient, on l'a vu, constitués de métaux, et l'arrivée des diélectriques offrait la possibilité de travailler avec des permittivités plus grandes et des pertes plus faibles, car débarrassées des pertes ohmiques propres aux métaux. Ce point a certes été nuancé par la suite, mais l'intérêt des diélectriques se comprend dès ce chapitre. Les troisième et quatrième parties du chapitre II, consacrées à l'analyse numérique des métamatériaux tout-diélectrique, montrent les difficultés inhérentes, et parfois insolubles (du moins actuellement), à la simulation de tels dispositifs. Les difficultés surviennent surtout lors de l'extraction des paramètres effectifs, ceux-ci étant souvent ambigus et parfois discordants dans la littérature.

Le troisième chapitre permet de comprendre le troisième terme de notre énoncé. Au térahertz, la permittivité des diélectriques est « perturbée » par les phonons optiques du réseau cristallin. Plus on se rapproche des premiers phonons, plus la permittivité relative du matériau, et les pertes associées, vont augmenter. Ceci limite de fait, pour nos applications, l'utilisation de beaucoup de diélectriques connus au térahertz et présentés dans ce chapitre. Nous avons néanmoins réussi à sélectionner deux céramiques, le  $\text{SrTiO}_3$  et le  $\text{TiO}_2$ , dont les caractéristiques respectent les conditions d'apparitions des résonances fixées en début de chapitre, toujours dans le but d'obtenir un indice négatif.

Enfin, le dernier chapitre se consacre aux résultats de cette thèse. Il expose de manière progressive les principaux résultats de simulations effectués. S'inspirant au départ des travaux de Thomas Lepetit aux micro-ondes, nous avons réussi à adapter ses dispositifs pour un fonctionnement dans la gamme térahertz, d'abord par une simple loi d'échelle. Ensuite, que ce soit avec le  $\text{SrTiO}_3$  ou le  $\text{TiO}_2$ , nous avons réussi à faire apparaître un indice négatif vers 0,35 THz. La conception de ces dispositifs ne s'est pas faite sans difficulté, nous les avons exposées au cours de ce chapitre également, mettant ainsi en évidence, de manière qualitative et quantitative, la grande sensibilité des résonateurs diélectriques aux paramètres géométriques. De plus, nous avons vu que le rôle du couplage, qu'il soit spatial ou fréquentiel, semble primordial dans l'obtention d'un indice négatif à partir de résonateurs diélectriques. De nombreux autres paramètres, pas forcément géométriques, ont été étudiés, certains de manière plus approfondie que d'autres. Il ressort de ces études que le rôle du milieu hôte est lui-aussi indéniable dans l'obtention d'un indice négatif, chose rarement soulignée dans les articles sur le sujet. Quant au concept de cellule élémentaire à un seul résonateur bimodal, il laisse entrevoir

une vraie possibilité d'amélioration des métamatériaux tout-diélectrique, en simplifiant grandement les cellules élémentaires et donc leur fabrication.

Le but premier de cette thèse était de montrer la faisabilité d'un métamatériau à indice négatif dans la gamme térahertz, à l'aide uniquement de diélectriques. D'un point de vue théorique, cet objectif a été atteint. Il manque en revanche la confirmation expérimentale, étape primordiale de validation d'un concept. Cette confirmation n'est pas impossible, elle n'a simplement pas été réalisée dans le temps imparti de cette thèse, pour diverses difficultés de fabrication que nous avons brièvement évoquées au chapitre III. Malgré tout, la mise en évidence d'un couplage spatial et fréquentiel particulier, en y distinguant deux régimes distincts, l'un connu, de simple « rapprochement » des modes de résonances, et l'autre moins connu, de dégénérescence des modes, représente un intérêt certain dans la compréhension totale de ce phénomène, encore difficilement expliqué actuellement car complexe à décrire.

Il n'y a donc aucun doute à avoir sur l'apport pratique des études paramétriques présentées au cours de cette thèse, et de l'apport théorique sur un aspect particulier du couplage inter-modal, encore aujourd'hui mal compris dans la littérature.







## Annexe A : Polarisation de la matière

L'homogénéité de la matière est une notion relative, tout est une question d'échelle. Un atome ou une molécule sont par nature hétérogènes, mais cela ne les empêche pas de former des groupes d'atomes ou des groupes de molécules qui eux sont homogènes. De la même manière, on peut définir des « méta-atomes » (naturels ou artificiels) si la longueur d'onde incidente est suffisamment grande devant les in-homogénéités, typiquement de l'ordre de  $\lambda / 10$ , un ordre de grandeur. On forme ainsi des milieux considérés comme homogènes à une échelle donnée. L'objectif des théories d'homogénéisation, ou théories du milieu effectif, est justement de définir des paramètres effectifs à une échelle donnée.

Nous rappelons d'abord la manière dont la matière se polarise en présence d'un champ électrique, étape importante pour aborder la théorie de Clausius-Mossotti qui permet justement de passer de la polarisation individuelle des atomes (partie A.1) à la réponse macroscopique du milieu (partie A.2). Puis nous aborderons la théorie de Maxwell Garnett (partie A.3) qui permet de déduire les paramètres effectifs d'un milieu dont les constituants élémentaires sont plus grands que des atomes, typiquement des inclusions dans un milieu hôte. Les formules qui en découlent sont utiles pour expliquer de manière analytique la réponse de nos structures.

### A.1 Polarisation individuelle à l'échelle microscopique

Dans la plupart des milieux, à l'échelle atomique, un champ électrique incident va entraîner l'oscillation du nuage électronique. Si le milieu est suffisamment dense (et même un gaz le peut), des dipôles électriques vont alors apparaître : le milieu se polarise. On appelle « diélectrique » un milieu susceptible de se polariser, cela peut aussi bien être un gaz, qu'un liquide ou un solide.

On l'a vu sur la figure III.2.1 du chapitre III, il existe pour les solides plusieurs types de polarisation, selon l'échelle considérée. On distingue trois contributions : électronique, ionique, et d'orientation (ou dipolaire). Intéressons-nous ici à la première contribution, celle des électrons, qui nous suffira, en première approximation, pour définir la permittivité et la perméabilité de notre milieu, d'autant qu'elle s'applique également aux milieux dilués, comme les gaz.

Pour décrire le mouvement des électrons autour du noyau des atomes, on peut appliquer le modèle des électrons élastiquement liés proposé par Lorentz (1853 - 1928), qui postule que chaque électron est traité comme un oscillateur harmonique subissant un amortissement proportionnel à sa vitesse. Dans ce modèle, on considère que l'application d'un champ électrique  $\mathbf{E}$  induit une oscillation du nuage électronique autour de sa position d'équilibre, générant un moment dipolaire  $\mathbf{p}$  entre les charges positives du noyau et les charges négatives des électrons (Figure A.1). On suppose ce moment dipolaire dominant par rapport aux autres moments multipolaires existants. Le mouvement du noyau est négligé en raison de sa masse importante par rapport à celle des électrons. Ce n'est pas le modèle le plus proche de la réalité, la théorie quantique est dorénavant plus précise, néanmoins ces deux modèles donnent des résultats équivalents pour nos cas de figures.

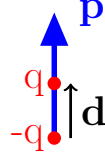


FIGURE A.1 – Dipôle électrique unique. Le moment dipolaire  $\mathbf{p}$  est relié aux charges individuelles par  $\mathbf{p} = q \cdot \mathbf{d}$ . Dans le cas des électrons la charge individuelle est la charge élémentaire négative  $-e$ .

Ainsi, en première approximation, on considère que :

- Le champ électromagnétique incident est uniforme.
- L'action des atomes voisins est négligé, le milieu est dilué.
- L'action du champ magnétique est négligé.

L'équation du mouvement d'un électron de masse  $m$  autour de sa position d'équilibre lorsqu'il entre en interaction avec une onde électromagnétique s'exprime ainsi :

$$\mathbf{F} = m(\ddot{\mathbf{r}} + \gamma \dot{\mathbf{r}} + \omega_0^2 \mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

avec  $\omega_0$  la fréquence de résonance de l'oscillateur,  $\gamma$  le terme de perte, lié à l'amortissement du mouvement des électrons, et  $F$  la force de Lorentz définie par :

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) \quad (\text{A.2})$$

où  $\mathbf{v}$  est la vitesse des électrons et  $e$  leur charge. L'effet du champ  $\mathbf{B}$  peut d'ailleurs être négligé car :

$$\frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|} \approx \frac{1}{c} \quad (\text{A.3})$$

et les vitesses en jeux ne sont pas relativistes.

Si on suppose le champ incident uniforme, dont la partie fréquentielle est du type :

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}'_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{A.4})$$

où  $\mathbf{E}'_0$  est indépendant de la position. Le déplacement  $\mathbf{r}$  des électrons va osciller avec la même fréquence, nous avons donc  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 e^{-i\omega t}$  et dans ce cas la solution de l'équation (A.1) s'écrit :

$$\mathbf{r}_0 = \frac{-e/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \mathbf{E}'_0 \quad (\text{A.5})$$

Comme rappelé sur la Figure A.1, le moment dipolaire de chaque électron est donné par  $\mathbf{p} = -e\mathbf{r}$ , la polarisation totale  $\mathbf{P}$  est donc la somme vectorielle de l'ensemble de ces dipôles par unité de volume. Pour une densité  $N$  d'atomes, on a :

$$\mathbf{P} = N\mathbf{p} \quad (\text{A.6})$$

Si on remplace  $\mathbf{p}$  par son expression en fonction de  $\mathbf{r}$ , on obtient pour  $\mathbf{P}$  :

$$\mathbf{P} = \frac{Ne^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \mathbf{E} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E} \quad (\text{A.7})$$

avec  $\chi_e$  la susceptibilité diélectrique du milieu considéré. La permittivité relative  $\epsilon_r$  à l'échelle macroscopique étant définie comme :

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \chi_e(\omega) \quad (\text{A.8})$$

on en déduit son expression complète :

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (\text{A.9})$$

Le numérateur ( $Ne^2/m\epsilon_0$ ) se nomme parfois la force de l'oscillateur et se note  $f$ ,  $\gamma$  désigne le facteur d'amortissement. La partie réelle et la partie imaginaire de la permittivité donnée par ce modèle de Lorentz (A.9) sont tracées sur la Figure A.2 pour deux forces d'oscillateurs différentes et adimensionnées, notées  $f_1$  et  $f_2$ , et deux facteurs d'amortissement différents et également adimensionnés, notés  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$ . Si la force de l'oscillateur est suffisamment grande et l'amortissement suffisamment faible, la permittivité peut devenir négative.

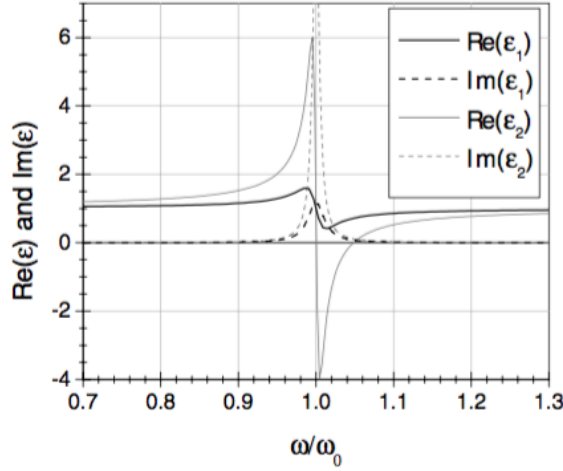


FIGURE A.2 – Partie réelle et imaginaire de la permittivité relative  $\epsilon_r$  via le modèle de Lorentz, définie par l'équation (A.9). Les paramètres pour  $\epsilon_1$  sont  $\gamma_1 = 0.025\omega_0$  et  $f_1^2 = 0.03\omega_0^2$ , ceux pour  $\epsilon_2$  sont  $\gamma_1 = 0.01\omega_0$  et  $f_1^2 = 0.1\omega_0^2$ . On voit que si la force de l'oscillateur est suffisamment grande et l'amortissement suffisamment faible, la permittivité peut devenir négative. Graphique repris de l'ouvrage de Ramakrishna et Grzegorzcyk [82].

Cependant, nous l'avons précisé, ce modèle de permittivité est valable pour des milieux dilués, où les interactions entre les atomes sont faibles, comme les gaz par exemples. Pour des milieux plus denses, il faut tenir compte de la polarisation due aux plus proches voisins également, ces derniers ayant un effet sur le champ  $\mathbf{E}$  appliqué. C'est là que la théorie de Clausius-Mossotti intervient.

## A.2 Du microscopique au macroscopique : Clausius-Mossotti

Développée à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, cette théorie est encore aujourd'hui très utilisée pour connaître les paramètres macroscopiques d'un milieu à partir de la réponse microscopique de ses constituants (atomes ou molécules) [151].

Considérons donc un cristal, dense par définition, dont les atomes se polarisent sous l'effet d'un champ appliqué  $\mathbf{E}_a$ . En raison de l'action des atomes voisins, le champ appliqué est différent du champ au niveau de l'atome, on parle dans ce cas de *champ local*. On note ce champ  $\mathbf{E}_l$ , il tient compte non seulement du champ appliqué  $\mathbf{E}_a$  mais aussi d'un champ de polarisation, noté  $\mathbf{E}_p$ , complexe à décrire, mais s'exprimant en fonction du vecteur de polarisation  $\mathbf{P}$  :

$$\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_a + \mathbf{E}_p = \mathbf{E}_a + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \quad (\text{A.10})$$

Le détail du calcul pour le champ de polarisation  $\mathbf{E}_p$ , aussi appelé champ de Lorentz, est trouvable dans le Kittel [123] ou le Ashcroft et Mermin [152]. Cette formule est très utilisée dans les théories des diélectriques, il est important de souligner que la contribution du réseau cristallin — différente de l'action des plus proches voisins — est aussi à prendre en compte dans le calcul. Par commodité, cette contribution est nulle dans la formule précédente, elle n'est donc valide que si les contributions de l'ensemble des atomes de la maille s'annulent en son centre (un réseau cubique par exemple). Si ce n'est pas le cas, une contribution cristalline est à prendre en compte (notée  $\mathbf{E}_c$  dans le Kittel [123]), nous ne le faisons pas ici.

La polarisabilité microscopique  $\alpha$  permet de relier le moment dipolaire  $\mathbf{p}$  d'un atome individuel dans un diélectrique au champ local  $\mathbf{E}_l$  par la relation :

$$\mathbf{p} = \epsilon_0 \alpha \mathbf{E}_l \quad (\text{A.11})$$

D'après (A.6) on peut écrire que :

$$\mathbf{P} = N \epsilon_0 \alpha \mathbf{E}_l \quad (\text{A.12})$$

En utilisant l'expression du champ local  $\mathbf{E}_l$  de l'équation (A.10) on en déduit :

$$\mathbf{P} = N \epsilon_0 \alpha \left( \mathbf{E}_a + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \right) \quad (\text{A.13})$$

Soit :

$$\mathbf{P} = \frac{N \epsilon_0 \alpha}{1 - \frac{N \alpha}{3}} \mathbf{E}_a \quad (\text{A.14})$$

Or, sachant d'après (A.7) que  $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}_a$ , on en déduit une expression de la susceptibilité macroscopique en fonction de la polarisabilité microscopique :

$$\chi = \frac{N \alpha}{1 - \frac{N \alpha}{3}} \quad (\text{A.15})$$

Ce qui, d'après (A.8), nous donne une expression à l'échelle macroscopique de la permittivité relative  $\epsilon_r$  du matériau :

$$\epsilon_r = 1 + \chi = \frac{3 + 2N\alpha}{3 - N\alpha} \quad (\text{A.16})$$

La permittivité macroscopique totale  $\epsilon$  s'écrit donc :

$$\epsilon = \epsilon_0 \frac{3 + 2N\alpha}{3 - N\alpha} \quad (\text{A.17})$$

De la même manière, on trouve pour la perméabilité macroscopique totale  $\mu$  :

$$\mu = \mu_0 \frac{3 + 2N\beta}{3 - N\beta} \quad (\text{A.18})$$

où  $\beta$  est la polarisabilité magnétique microscopique du milieu. Ces deux équations sont les relations de Clausius-Mossotti. Elles sont plus souvent écrites sous cette forme :

$$\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0} = \frac{N\alpha}{3} \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\mu - \mu_0}{\mu + 2\mu_0} = \frac{N\beta}{3} \quad (\text{A.20})$$

### A.3 Inclusions dans un milieu hôte : Maxwell Garnett

Les formules d'homogénéisation de Clausius-Mossotti permettent de passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Mais à une échelle plus grande, lorsque les inhomogénéités dépassent la taille de l'atome ou de la molécule, il faut adopter d'autres modèles car les formules précédentes deviennent insuffisantes. Dans notre cas, nous nous intéressons au problème des inclusions discrètes (*i.e.* en faible quantité) dans un milieu hôte, comme représenté sur la figure A.3. Pour ce cas de figure, ce sont les formules d'homogénéisation de Maxwell Garnett qui sont les mieux adaptées. Nous allons voir ici de manière succincte leur principe et de quelle manière elles répondent à notre problème.

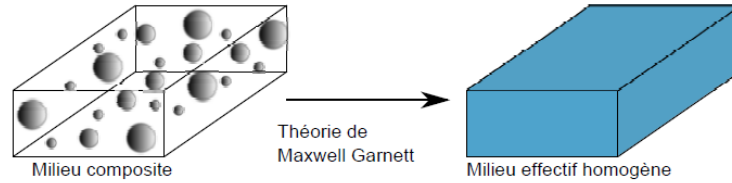


FIGURE A.3 – Principe d'homogénéisation de Maxwell Garnett : l'idée est de passer d'un milieu composite constitué d'inclusions discrètes dans un milieu hôte à un milieu *effectif* homogène (*i.e.* sans inclusion) équivalent, avec la même permittivité et la même perméabilité [120].

#### A.3.1 Approche classique de Maxwell Garnett

Au premier abord, on peut voir les formules de Maxwell Garnett comme une généralisation des formules (A.17) et (A.18) de la partie précédente. En effet, cette méthode part du principe qu'un milieu composé d'inclusions discrètes ( $\epsilon_i, \mu_i$ ) et diluées dans un milieu hôte ( $\epsilon_h, \mu_h$ ) aura une permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  et une perméabilité *effective*  $\mu_{eff}$

analogues à celles données par les relations de Clausius-Mossotti :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_h \frac{3 + 2N\alpha_i}{3 - N\alpha_i} \quad (\text{A.21})$$

$$\mu_{eff} = \mu_h \frac{3 + 2N\beta_i}{3 - N\beta_i} \quad (\text{A.22})$$

où  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  sont respectivement les polarisabilités électrique et magnétique des inclusions. Dans notre cas précis de résonateurs cylindriques 2D dans un milieu hôte, le champ local  $\mathbf{E}_l$  est différent de la formule (A.10) car la polarisation n'a d'effet que dans deux directions de l'espace seulement :

$$\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_a + \frac{\mathbf{P}}{2\epsilon_0\epsilon_i} \quad (\text{A.23})$$

De plus, d'après (A.7) et (A.8) :

$$\mathbf{P} = \epsilon_0(\epsilon_{eff} - \epsilon_h)\mathbf{E}_l \quad (\text{A.24})$$

où  $(\epsilon_{eff} - \epsilon_h)$  est analogue à  $(1 - \epsilon_r)$  dans un milieu classique.

En égalant cette expression avec (A.12) une nouvelle formule pour la permittivité *effective*  $\mu_{eff}$  se trouve, similaire à (A.21) :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_h \frac{2 + N_s\alpha_i}{2 - N_s\alpha_i} \quad (\text{A.25})$$

où  $N_s$  est le nombre de dipôles par unité de *surface* cette fois-ci, puisque le problème est 2D. Dans le cas d'un cylindre, la polarisabilité statique  $\alpha_i$  dans le mode TE s'écrit :

$$\alpha_i = S(\epsilon_i - \epsilon_h) \frac{2\epsilon_h}{\epsilon_i - \epsilon_h} \quad (\text{A.26})$$

où  $S$  est la surface unitaire, ce qui nous permet de définir un taux de remplissage surfacique  $f_s = N_s S$ . En ajoutant l'expression de cette polarisabilité statique dans la formule de la permittivité *effective*  $\epsilon_{eff}$  2D de l'équation (A.25), on trouve :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_h + 2f \frac{\epsilon_h(\epsilon_i - \epsilon_h)}{\epsilon_h + \epsilon_i - f(\epsilon_i - \epsilon_h)} \quad (\text{A.27})$$

Cette formule est identique à l'expression plus générale donnée par Sihvola en 2005 [153], qui tient compte d'un facteur de dépolarisation  $L$  :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_h + f \frac{\epsilon_h(\epsilon_i - \epsilon_h)}{\epsilon_h + (1 - f)L(\epsilon_i - \epsilon_h)} \quad (\text{A.28})$$

avec dans notre cas  $L = \frac{1}{2}$  puisque nos calculs sont en incidence normale et ne tiennent pas compte d'une anisotropie éventuelle.

Cependant, comme pour tout milieu effectif, ces formules ne sont valides que pour des longueurs d'onde très supérieures à la dimension des particules. On a fixé cette condition à  $\lambda/10$  au chapitre III (équation (III.1.3)).

De plus, ces formules sont valables dans un régime statique ( $\mathbf{E}_l$  constant), ou quasi-statique, non dans un régime dynamique ( $\mathbf{E}_l$  dépend du temps). Or, nous avons besoin de prendre en compte les résonances de Mie de nos structures, ce que les formules ci-dessus ne permettent pas. C'est pourquoi il existe une formulation différente des relations de Maxwell Garnett, appelée *Théorie de Maxwell Garnett étendue*, qui prend en compte la polarisabilité dynamique, dérivée de la théorie de Mie [154].

### A.3.2 Théorie de Maxwell Garnett étendue

Avec cette approche, les résonances de Mie, notamment magnétiques, peuvent être décrites. En réalité, la permittivité relative des inclusions  $\epsilon_i$  dans les équations précédentes n'est plus une constante, mais devient résonante. Elle se note  $\tilde{\epsilon}_i$  et s'exprime ainsi [59] :

$$\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i \frac{J_1(k_s r_s)}{k_s r_s J_0(k_s r_s) - J_1(k_s r_s)} \quad (\text{A.29})$$

avec  $J_0$  et  $J_1$  les fonctions de Bessel  $J_m(x)$  pour les deux premiers termes dipolaires  $m = 0$  et  $m = 1$ . Ainsi, on travaille avec une expression similaire à (A.27) :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_h + 2f \frac{\epsilon_h(\tilde{\epsilon}_i - \epsilon_h)}{\epsilon_h + \tilde{\epsilon}_i - f(\tilde{\epsilon}_i - \epsilon_h)} \quad (\text{A.30})$$

Cette équation prend en compte les résonances de Mie de nos structures et nous permet de retrouver les résultats de simulations de manière analytiques [59].





# Publications

## Articles

- F. Gaufillet, S. Marcellin, E. Akmansoy « Dielectric metamaterials for flat lens at terahertz frequency » (2015 - JOSA B - Soumis)
- S. Marcellin, E. Akmansoy « Negative index and mode coupling in all-dielectric metamaterials at terahertz frequencies » (2016 - en cours de rédaction)

## Conférences nationales

- S. Marcellin, E. Akmansoy « Indice négatif et couplage modal dans un métamatériau tout diélectrique dans le domaine térahertz » GDR Ondes - Dispositifs nanophotoniques : antennes optiques, résonateurs et forces optiques (12 et 13 janvier 2015 - Dijon, France).
- S. Marcellin, E. Akmansoy « Indice négatif et couplage modal dans un métamatériau tout diélectrique dans le domaine térahertz » XIX<sup>èmes</sup> Journées Nationales Microondes (3-5 Juin 2015 - Bordeaux, France)
- S. Marcellin, E. Akmansoy « Indice négatif et couplage modal dans les métamatériaux "tout-diélectrique" pour le térahertz » 16<sup>èmes</sup> Journées de Caractérisation Microondes et Matériaux (23-25 Mars 2016 - Calais, France)

## Conférences internationales

- S. Marcellin, E. Akmansoy « Negative index and mode coupling in all-dielectric metamaterials at terahertz frequencies » 9th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics - Metamaterials 2015 (7-12 Septembre 2015 - Oxford, United Kingdom).



# Références

- [1] JB Pendry. Electromagnetic materials enter the negative age. *Physics World*, 14(9) :47–51, 2001.
- [2] V. G. Veselago. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ . *Physics-Uspekhi*, 10(4) :509–514, 1968.
- [3] Nikolay I. Zheludev and Yuri S. Kivshar. From metamaterials to metadevices. *Nat Mater*, 11(11) :917–924, 11 2012.
- [4] Jagadis Chunder Bose. On the rotation of plane of polarisation of electric waves by a twisted structure. *Proceedings of the Royal Society of London*, 63(389-400) :146–152, 1898.
- [5] Ismo V Lindell, Ari H Sihvola, and Juhani Kurkijärvi. Karl F. Lindman : The last Hertzian, and a harbinger of electromagnetic chirality. *Antennas and Propagation Magazine, IEEE*, 34(3) :24–30, 1992.
- [6] Sergei Alexander Schelkunoff and Harald T Friis. *Antennas : theory and practice*, volume 639. Wiley New York, 1952.
- [7] D.T. Emerson. The work of Jagadis Chandra Bose : 100 years of millimeter-wave research. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 45(12) :2267–2273, Dec 1997.
- [8] JB Pendry, AJ Holden, WJ Stewart, and I Youngs. Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. *Physical review letters*, 76(25) :4773, 1996.
- [9] J.B. Pendry, A.J. Holden, D.J. Robbins, and W.J. Stewart. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 47(11) :2075–2084, Nov 1999.
- [10] WN Hardy and LA Whitehead. Split-ring resonator for use in magnetic resonance from 200–2000 MHz. *Review of Scientific Instruments*, 52(2) :213–216, 1981.
- [11] D. R. Smith, Willie J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz. Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4184–4187, May 2000.
- [12] R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, 292 :77–79, 2001.
- [13] Vladimir M. Shalaev, Wenshan Cai, Uday K. Chettiar, Hsiao-Kuan Yuan, Andrey K. Sarychev, Vladimir P. Drachev, and Alexander V. Kildishev. Negative index of refraction in optical metamaterials. *Opt. Lett.*, 30(24) :3356–3358, Dec 2005.
- [14] Peter Markos and Costas Soukoulis. Transmission properties and effective electromagnetic parameters of double negative metamaterials. *Opt. Express*, 11(7) :649–661, Apr 2003.
- [15] C. G. Parazzoli, R. B. Greegor, K. Li, B. E. C. Koltenbah, and M. Tanielian. Experimental Verification and Simulation of Negative Index of Refraction Using Snell’s Law. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :107401, Mar 2003.
- [16] Ta-Jen Yen, WJ Padilla, Nicholas Fang, DC Vier, DR Smith, JB Pendry, DN Basov, and Xiang Zhang. Terahertz magnetic response from artificial materials. *Science*, 303(5663) :1494–1496, 2004.

- [17] N Katsarakis, G Konstantinidis, A Kostopoulos, RS Penciu, TF Gundogdu, M Kafesaki, EN Economou, Th Koschny, and CM Soukoulis. Magnetic response of split-ring resonators in the far-infrared frequency regime. *Optics Letters*, 30(11) :1348–1350, 2005.
- [18] Shuang Zhang, Wenjun Fan, BK Minhas, Andrew Frauenglass, KJ Malloy, and SRJ Brueck. Midinfrared resonant magnetic nanostructures exhibiting a negative permeability. *Physical review letters*, 94(3) :037402, 2005.
- [19] H. O. Moser, B. D. F. Casse, O. Wilhelmi, and B. T. Saw. Terahertz Response of a Microfabricated Rod-Split-Ring-Resonator Electromagnetic Metamaterial. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :063901, Feb 2005.
- [20] Stefan Linden, Christian Enkrich, Martin Wegener, Jiangfeng Zhou, Thomas Koschny, and Costas M. Soukoulis. Magnetic response of metamaterials at 100 terahertz. *Science*, 306(5700) :1351–1353, 2004.
- [21] Gunnar Dolling, Christian Enkrich, Martin Wegener, Costas M Soukoulis, and Stefan Linden. Low-loss negative-index metamaterial at telecommunication wavelengths. *Optics Letters*, 31(12) :1800–1802, 2006.
- [22] J. Zhou, Th. Koschny, M. Kafesaki, E. N. Economou, J. B. Pendry, and C. M. Soukoulis. Saturation of the Magnetic Response of Split-Ring Resonators at Optical Frequencies. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :223902, Nov 2005.
- [23] Costas M. Soukoulis, Thomas Koschny, Jiangfeng Zhou, Maria Kafesaki, and Eleftherios N. Economou. Magnetic response of split ring resonators at terahertz frequencies. *physica status solidi (b)*, 244(4) :1181–1187, 2007.
- [24] Vladimir M Shalaev. Optical negative-index metamaterials. *Nature photonics*, 1(1) :41–48, 2007.
- [25] Nikolay I Zheludev. The road ahead for metamaterials. *Science*, 328(5978) :582–583, 2010.
- [26] Craig F Bohren and Donald R Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008.
- [27] O’Brien and J B Pendry. Magnetic activity at infrared frequencies in structured metallic photonic crystals. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 14(25) :6383, 2002.
- [28] Christopher L Holloway, Edward F Kuester, James Baker-Jarvis, and Pavel Kabos. A double negative (DNG) composite medium composed of magnetodielectric spherical particles embedded in a matrix. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 51(10) :2596–2603, 2003.
- [29] Orest G Vendik and MS Gashinova. Artificial double negative (DNG) media composed by two different dielectric sphere lattices embedded in a dielectric matrix. In *Microwave Conference, 2004. 34th European*, volume 3, pages 1209–1212. IEEE, 2004.
- [30] I Vendik, O Vendik, I Kolmakov, and M Odit. Modelling of isotropic double negative media for microwave applications. *Opto-Electronics Review*, 14(3) :179–186, 2006.
- [31] T. Lepetit, E. Akmansoy, and J.-P. Ganne. Experimental measurement of negative index in an all-dielectric metamaterial. *Applied Physics Letters*, 95(12) :121101, 2009.

- [32] Davy P Gaillot, Charles Croenne, and Didier Lippens. An all-dielectric route for terahertz cloaking. *Optics express*, 16(6) :3986–3992, 2008.
- [33] H. Nemec, P. Kuzel, F. Kadlec, C. Kadlec, R. Yahiaoui, and P. Mounaix. Tunable terahertz metamaterials with negative permeability. *Phys. Rev. B*, 79 :241108, Jun 2009.
- [34] James C Ginn, Igal Brener, David W Peters, Joel R Wendt, Jeffrey O Stevens, Paul F Hines, Lorena I Basilio, Larry K Warne, Jon F Ihlefeld, Paul G Clem, et al. Realizing optical magnetism from dielectric metamaterials. *Physical review letters*, 108(9) :097402, 2012.
- [35] Sylvain Lannebere, Salvatore Campione, Ashod Aradian, Matteo Albani, and Filippo Capolino. Artificial magnetism at terahertz frequencies in 3D arrays of TiO<sub>2</sub> microspheres including spatial dispersion and magnetoelectric coupling. In *Antennas and Propagation Society International Symposium (APSURSI), 2013 IEEE*, pages 1376–1377. IEEE, 2013.
- [36] Byoung-Joon Seo, Tetsuya Ueda, Tatsuo Itoh, and Harold Fetterman. Isotropic left handed material at optical frequency with dielectric spheres embedded in negative permittivity medium. *Applied physics letters*, 88(16) :161122, 2006.
- [37] Y. G. Ma, L. Zhao, P. Wang, and C. K. Ong. Fabrication of negative index materials using dielectric and metallic composite route. *Applied Physics Letters*, 93(18) :184103, 2008.
- [38] Xiaobing Cai, Rui Zhu, and Gengkai Hu. Experimental study for metamaterials based on dielectric resonators and wire frame. *Metamaterials*, 2(4) :220–226, 2008.
- [39] Jaewon Kim and Anand Gopinath. Simulation of a metamaterial containing cubic high dielectric resonators. *Physical Review B*, 76(11) :115126, 2007.
- [40] Riad Yahiaoui, U-C Chung, Catherine Elissalde, Mario Maglione, Valerie Vigneras, and Patrick Mounaix. Towards left-handed metamaterials using single-size dielectric resonators : The case of TiO<sub>2</sub>-disks at millimeter wavelengths. *Applied Physics Letters*, 101(4) :042909, 2012.
- [41] Salvatore Campione, Michael B Sinclair, and Filippo Capolino. Effective medium representation and complex modes in 3D periodic metamaterials made of cubic resonators with large permittivity at mid-infrared frequencies. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 11(4) :423–435, 2013.
- [42] Yue-Jun Lai, Cheng-Kuang Chen, and Ta-Jen Yen. Creating negative refractive identity via single-dielectric resonators. *Optics express*, 17(15) :12960–12970, 2009.
- [43] Jun Wang, Zhuo Xu, Zhenhua Yu, Xiaoyong Wei, Yiming Yang, Jiafu Wang, and Shaobo Qu. Experimental realization of all-dielectric composite cubes/rods left-handed metamaterial. *Journal of Applied Physics*, 109(8) :084918, 2011.
- [44] Mark S Wheeler, J Stewart Aitchison, and Mohammad Mojahedi. Coated nonmagnetic spheres with a negative index of refraction at infrared frequencies. *Physical Review B*, 73(4) :045105, 2006.
- [45] Bogdan-Ioan Popa and Steven Cumber. Compact Dielectric Particles as a Building Block for Low-Loss Magnetic Metamaterials. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :207401, May 2008.
- [46] Parikshit Moitra, Brian A Slovick, Zhi Gang Yu, S Krishnamurthy, and Jason Valentine. Experimental demonstration of a broadband all-dielectric metamaterial perfect reflector. *Applied Physics Letters*, 104(17) :171102, 2014.

- [47] Parikshit Moitra, Yuanmu Yang, Zachary Anderson, Ivan I. Kravchenko, Dayrl P. Briggs, and Jason Valentine. Realization of an all-dielectric zero-index optical metamaterial. *Nat Photon*, 7(10) :791–795, October 2013.
- [48] Alexander Krasnok, Sergey Makarov, Mikhail Petrov, Roman Savelev, Pavel Belov, and Yuri Kivshar. Towards all-dielectric metamaterials and nanophotonics. In *arXiv preprint arXiv :1503.08857*, pages 950203–950203. International Society for Optics and Photonics, 2015.
- [49] R. D. Richtmyer. Dielectric Resonators. *Journal of Applied Physics*, 10 :391–398, 1939.
- [50] B.W. Hakki and P.D. Coleman. A Dielectric Resonator Method of Measuring Inductive Capacities in the Millimeter Range. *Microwave Theory and Techniques, IRE Transactions on*, 8(4) :402–410, July 1960.
- [51] HM Schlicke. Quasi-Degenerated Modes in High-epsilon Dielectric Cavities. *Journal of Applied Physics*, 24(2) :187–191, 1953.
- [52] S Jerry Fiedziuszko, Ian C Hunter, Tatsuo Itoh, Yoshio Kobayashi, Toshio Nishikawa, Steven N Stitzer, and Kikuo Wakino. Dielectric materials, devices, and circuits. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 50(3) :706–720, 2002.
- [53] G. Rupprecht and R. O. Bell. Microwave Losses in Strontium Titanate above the Phase Transition. *Phys. Rev.*, 125 :1915–1920, Mar 1962.
- [54] A. Okaya and L.F. Barash. The Dielectric Microwave Resonator. *Proceedings of the IRE*, 50(10) :2081–2092, Oct 1962.
- [55] Seymour B. Cohn. Microwave Bandpass Filters Containing High-Q Dielectric Resonators. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 16(4) :218–227, Apr 1968.
- [56] Pierre Filhol. *Resonateurs Dielectriques*. Techniques de l’ingénieur - E1922, 2004.
- [57] DJ Masse, RA Pucel, DW Readey, and CP Hartwig. A new low-loss high-k temperature-compensated dielectric for microwave applications. *Proceedings of the IEEE*, 59(11) :1628–1629, 1971.
- [58] T Nishikawa, Kikuo Wakino, H Tamura, H Tanaka, and Y Ishikawa. Precise measurement method for temperature coefficient of microwave dielectric resonator material. In *1987 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, pages 277–280, 1987.
- [59] Thomas Lepetit. *Métamatériaux tout diélectrique micro-ondes*. PhD thesis, Paris 11, 2010.
- [60] T. Lepetit, E. Akmansoy, and J.-P. Ganne. Experimental evidence of resonant effective permittivity in a dielectric metamaterial. *Journal of Applied Physics*, 109(2) :023115, 2011.
- [61] J. B. Pendry, D. Schurig, and D. R. Smith. Controlling Electromagnetic Fields. *Science*, 312(5781) :1780–1782, 2006.
- [62] A. Nicolet, J. Remacle, B. Meys, A. Genon, and W. Legros. Transformation methods in computational electromagnetism. *Journal of Applied Physics*, 75(10) :6036–6038, 1994.
- [63] AJ Ward and JB Pendry. Refraction and geometry in Maxwell’s equations. *Journal of modern optics*, 43(4) :773–793, 1996.

- [64] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr, and D. R. Smith. Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies. *Science*, 314(5801) :977–980, 2006.
- [65] John Pendry. Taking the wraps off cloaking. *Physics*, 2(95), 2009.
- [66] Jason Valentine, Jensen Li, Thomas Zentgraf, Guy Bartal, and Xiang Zhang. An optical cloak made of dielectrics. *Nat Mater*, 8(7) :568–571, July 2009.
- [67] Xianzhong Chen, Yu Luo, Jingjing Zhang, Kyle Jiang, John B. Pendry, and Shuang Zhang. Macroscopic invisibility cloaking of visible light. *Nat Commun*, 2 :176, 02 2011.
- [68] S Brule, EH Javelaud, S Enoch, and S Guenneau. Experiments on seismic metamaterials : Molding surface waves. *Physical review letters*, 112(13) :133901, 2014.
- [69] Sébastien Guenneau, Alexander Movchan, Gunnar Pétursson, and S Anantha Ramakrishna. Acoustic metamaterials for sound focusing and confinement. *New Journal of physics*, 9(11) :399, 2007.
- [70] Antonio Amariti, Davide Forcella, and Alberto Mariotti. Negative refractive index in hydrodynamical systems. *Journal of High Energy Physics*, 2013(1) :1–16, 2013.
- [71] J. B. Pendry. Negative Refraction Makes a Perfect Lens. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :3966–3969, Oct 2000.
- [72] D. R. Smith, J. B. Pendry, and M. C. K. Wiltshire. Metamaterials and Negative Refractive Index. *Science*, 305(5685) :788–792, 2004.
- [73] Anthony Grbic and George V Eleftheriades. Overcoming the diffraction limit with a planar left-handed transmission-line lens. *Physical Review Letters*, 92(11) :117403, 2004.
- [74] Nicholas Fang, Hyesog Lee, Cheng Sun, and Xiang Zhang. Sub Diffraction-Limited Optical Imaging with a Silver Superlens. *Science*, 308(5721) :534–537, 2005.
- [75] Kevin Buell, Hossein Mosallaei, and Kamal Sarabandi. A Substrate for Small Patch Antennas Providing Tunable Miniaturization Factors. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 54(1) :135, 2006.
- [76] Jiaming Hao, Jing Wang, Xianliang Liu, Willie J Padilla, Lei Zhou, and Min Qiu. High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial. *Applied Physics Letters*, 96(25) :251104, 2010.
- [77] Alexandre Sellier, Tatiana V Teperik, and André de Lustrac. Resonant circuit model for efficient metamaterial absorber. *Optics express*, 21(106) :A997–A1006, 2013.
- [78] Na Liu, Thomas Weiss, Martin Mesch, Lutz Langguth, Ulrike Eigenthaler, Michael Hirscher, Carsten Sonnichsen, and Harald Giessen. Planar metamaterial analogue of electromagnetically induced transparency for plasmonic sensing. *Nano letters*, 10 :1103–1107, 2009.
- [79] Supradeep Narayana and Yuki Sato. Heat flux manipulation with engineered thermal materials. *Physical review letters*, 108(21) :214303, 2012.
- [80] Lev Davidovich Landau, JS Bell, MJ Kearsley, LP Pitaevskii, EM Lifshitz, and JB Sykes. *Electrodynamics of continuous media*, volume 8. elsevier, 1984.
- [81] John David Jackson and John D Jackson. *Classical electrodynamics*, volume 3. Wiley New York etc., 1962.



- [82] S Anantha Ramakrishna and Tomasz M Grzegorzcyk. *Physics and applications of negative refractive index materials*. CRC press, 2008.
- [83] L. Brillouin. *Wave Propagation and Group Velocity*. Academic Press Inc. (London) LTD., 1960.
- [84] Gunnar Dolling, Christian Enkrich, Martin Wegener, Costas M Soukoulis, and Stefan Linden. Simultaneous negative phase and group velocity of light in a metamaterial. *Science*, 312(5775) :892–894, 2006.
- [85] Ruopeng Liu, Aloyse Degiron, Jack J Mock, and David R Smith. Negative index material composed of electric and magnetic resonators. *Applied Physics Letters*, 90(26) :263504, 2007.
- [86] Davy Gerard, Jerome Wenger, Alexis Devilez, David Gachet, Brian Stout, Nicolas Bonod, Evgeny Popov, and Herve Rigneault. Strong electromagnetic confinement near dielectric microspheres to enhance single-molecule fluorescence. *Optics express*, 16(19) :15297–15303, 2008.
- [87] Jon A Schuller and Mark L Brongersma. General properties of dielectric optical antennas. *Optics express*, 17(26) :24084–24095, 2009.
- [88] Lukas Novotny and Bert Hecht. *Principles of Nano-optics*. Cambridge university press, 2012.
- [89] Qian Zhao, Ji Zhou, Fuli Zhang, and Didier Lippens. Mie resonance-based dielectric metamaterials. *Materials Today*, 12(12) :60 – 69, 2009.
- [90] F Dominec, C Kadlec, H Němec, P Kužel, and F Kadlec. Transition between metamaterial and photonic-crystal behavior in arrays of dielectric rods. *Optics express*, 22(25) :30492–30503, 2014.
- [91] Tatsuo Itoh and Ronald Rudokas. New method for computing the resonant frequencies of dielectric resonators. In *6th European Microwave Conference*, volume 1, pages 702–706, 1976.
- [92] S Jerry Fiedziuszko and Stephen Holme. Dielectric resonators raise your high-Q. *Microwave Magazine, IEEE*, 2(3) :50–60, 2001.
- [93] Darko Kajfez and Pierre Guillon. Dielectric resonators. *Norwood, MA, Artech House, Inc., 1986, 547 p.*, 1, 1986.
- [94] Qian Zhao, Lei Kang, B Du, H Zhao, Q Xie, X Huang, B Li, J Zhou, and L Li. Experimental demonstration of isotropic negative permeability in a three-dimensional dielectric composite. *Physical review letters*, 101(2) :027402, 2008.
- [95] Qian Zhao, Bo Du, Lei Kang, Hongjie Zhao, Qin Xie, Bo Li, Xing Zhang, Ji Zhou, Longtu Li, and Yonggang Meng. Tunable negative permeability in an isotropic dielectric composite. *Applied Physics Letters*, 92(5) :051106, 2008.
- [96] T Giannakopoulou, D Niarchos, and C Trapalis. Experimental investigation of electric and magnetic responses in composites with dielectric resonator inclusions at microwave frequencies. *Applied Physics Letters*, 94(24) :242506, 2009.
- [97] Alexandre Leblanc. *Modélisation numérique des résonances par une formulation intégrale Application au confort acoustique dans une cavité 3D*. PhD thesis, Université d’Artois, 2008.
- [98] J. C. Maxwell Garnett. Colours in Metal Glasses, in Metallic Films, and in Metallic Solutions. II. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series*

- A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 205 :pp. 237–288, 1906.
- [99] D. A. G. Bruggeman. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen. *Annalen der Physik*, 416(7) :636–664, 1935.
- [100] Salvatore Campione, Sylvain Lannebère, Ashod Aradian, Matteo Albani, and Filippo Capolino. Complex modes and artificial magnetism in three-dimensional periodic arrays of titanium dioxide microspheres at millimeter waves. *JOSA B*, 29(7) :1697–1706, 2012.
- [101] C Craeye, X Radu, A Schuchinsky, and F Capolino. *Fundamentals of method of moments for metamaterials - Chap. 5 Theory and Phenomena of Metamaterials*. Taylor and Francis, 2009.
- [102] Filippo Capolino. *Theory and phenomena of metamaterials*. Chap 6 : FDTD Method for Periodic Structures. CRC Press, 2009.
- [103] Thomas Weiland. A discretization model for the solution of Maxwell’s equations for six-component fields. *Archiv Elektronik und Uebertragungstechnik*, 31 :116–120, 1977.
- [104] Kezhong Zhao, Vineet Rawat, Seung-Cheol Lee, and Jin-Fa Lee. A domain decomposition method with nonconformal meshes for finite periodic and semi-periodic structures. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 55(9) :2559–2570, 2007.
- [105] Kenneth H Huebner, Donald L Dewhurst, Douglas E Smith, and Ted G Byrom. *The finite element method for engineers*. John Wiley & Sons, 2008.
- [106] John E Akin, John Edward Akin, John Edward Akin, and John Edward Akin. *Finite element analysis for undergraduates*, volume 10. Academic Press London, 1986.
- [107] Andrew Ronald Mitchell and R Wait. *The finite element method in partial differential equations*. Wiley New York, 1977.
- [108] Ansoft, LLC, 225 West Station Square Drive, Suite 200, Pittsburgh, PA 15219. *An Introduction to HFSS : An Introduction to HFSS : Fundamental Principles, Concepts, and Use*, 2009.
- [109] A.M. Nicolson and G.F. Ross. Measurement of the Intrinsic Properties of Materials by Time-Domain Techniques. *Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions on*, 19(4) :377–382, Nov 1970.
- [110] William B. Weir. Automatic measurement of complex dielectric constant and permeability at microwave frequencies. *Proceedings of the IEEE*, 62(1) :33–36, Jan 1974.
- [111] Xudong Chen, Tomasz M. Grzegorzcyk, Bae-Ian Wu, Joe Pacheco, and Jin Au Kong. Robust method to retrieve the constitutive effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. E*, 70 :016608, Jul 2004.
- [112] Z. Szabo, Gi-Ho Park, R. Hedge, and Er-Ping Li. A Unique Extraction of Metamaterial Parameters Based on Kramers-Kronig Relationship. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 58(10) :2646–2653, Oct 2010.
- [113] Vasundara V Varadan and Ruyen Ro. Unique retrieval of complex permittivity and permeability of dispersive materials from reflection and transmitted fields by

- enforcing causality. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 55(10) :2224–2230, 2007.
- [114] Samel Arslanagic, Troels V Hansen, N Asger Mortensen, Anders Heidemann Gregersen, Ole Sigmund, Richard W Ziolkowski, and Olav Breinbjerg. A review of the scattering-parameter extraction method with clarification of ambiguity issues in relation to metamaterial homogenization. *Antennas and Propagation Magazine, IEEE*, 55(2) :91–106, 2013.
- [115] D. Smith, S. Schultz, P. Markos, and C. Soukoulis. Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission coefficients. *Phys. Rev. B*, 65 :195104, Apr 2002.
- [116] T. Koschny, P. Markos, D. R. Smith, and C. M. Soukoulis. Resonant and antiresonant frequency dependence of the effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. E*, 68 :065602, Dec 2003.
- [117] JE Sipe and J Van Kranendonk. Energy band models for spatially dispersive dielectric media. *Canadian Journal of Physics*, 53(19) :2095–2122, 1975.
- [118] PA Belov, SA Tretyakov, and AJ Viitanen. Nonreciprocal microwave band-gap structures. *Physical Review E*, 66(1) :016608, 2002.
- [119] C.R. Simovski, Pavel A. Belov, and Sailing He. Backward wave region and negative material parameters of a structure formed by lattices of wires and split-ring resonators. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 51(10) :2582–2591, Oct 2003.
- [120] Sylvain Lannebère. *Etude theorique de metamateriaux formes de particules dielectriques resonantes dans la gamme submillimetrique : magnetisme artificiel et indice de refraction negatif*. PhD thesis, Universite Bordeaux 1, 2011.
- [121] Takaaki Tsurumi, Kouji Soejima, Toshio Kamiya, and Masaki Daimon. Mechanism of diffuse phase transition in relaxor ferroelectrics. *Japanese journal of applied physics*, 33(4R) :1959, 1994.
- [122] Takaaki Tsurumi, Jianyong Li, Takuya Hoshina, Hirofumi Kakemoto, Masafumi Nakada, and Jun Akedo. Ultrawide range dielectric spectroscopy of BaTiO<sub>3</sub>-based perovskite dielectrics. *Applied Physics Letters*, 91(18) :182905, 2007.
- [123] Ch Kittel. *Physique de l’Etat solide*, 7e Ed. Dunod, 1996.
- [124] Tatsuya Mori, Hikaru Igawa, and Seiji Kojima. Progress of ultrafast terahertz time-domain spectroscopy : Raman inactive soft mode in quantum paraelectric SrTiO<sub>3</sub>. *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, 54(1) :012006, 2014.
- [125] Jianguang Han, Fan Wan, Zhiyuan Zhu, and Weili Zhang. Dielectric response of soft mode in ferroelectric SrTiO<sub>3</sub>. *Applied Physics Letters*, 90(3) :031104, 2007.
- [126] Dwight W Berreman and FC Unterwald. Adjusting Poles and Zeros of Dielectric Dispersion to Fit Reststrahlen of PrCl<sub>3</sub> and LaCl<sub>3</sub>. *Physical Review*, 174(3) :791, 1968.
- [127] RP Lowndes. Influence of Lattice Anharmonicity on the Longitudinal Optic Modes of Cubic Ionic Solids. *Physical Review B*, 1(6) :2754, 1970.
- [128] Francois Gervais and Bernard Piriou. Anharmonicity in several-polar-mode crystals : adjusting phonon self-energy of LO and TO modes in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and TiO<sub>2</sub> to fit infrared reflectivity. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 7(13) :2374, 1974.

- [129] Boutelala Abderahmane. *Elaboration et caractérisation de couches minces de  $\text{TiO}_2$  dopé*. PhD thesis, Université Mentouri - Constantine, 2012.
- [130] Naoki Matsumoto, Tadasu Hosokura, Keisuke Kageyama, Hiroshi Takagi, Yukio Sakabe, and Masanori Hangyo. Analysis of Dielectric Response of  $\text{TiO}_2$  in Terahertz Frequency Region by General Harmonic Oscillator Model. *Japanese Journal of Applied Physics*, 47(9S) :7725, 2008.
- [131] AS Barker Jr. Temperature Dependence of the Transverse and Longitudinal Optic Mode Frequencies and Charges in  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{BaTiO}_3$ . *Physical Review*, 145(2) :391, 1966.
- [132] WG Spitzer, Robert C Miller, DA Kleinman, and LE Howarth. Far Infrared Dielectric Dispersion in  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$ , and  $\text{TiO}_2$ . *Physical Review*, 126(5) :1710, 1962.
- [133] Katalin Kamaras, K-L Barth, F Keilmann, R Henn, M Reedyk, C Thomsen, M Cardona, J Kircher, PL Richards, and J-L Stehle. The low-temperature infrared optical functions of  $\text{SrTiO}_3$  determined by reflectance spectroscopy and spectroscopic ellipsometry. *Journal of applied physics*, 78(2) :1235–1240, 1995.
- [134] Klaus Berdel, Jaime Gemez Rivas, Peter Haring Bolivar, Peter De Maagt, and Heinrich Kurz. Temperature dependence of the permittivity and loss tangent of high-permittivity materials at terahertz frequencies. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 53(4) :1266–1271, 2005.
- [135] M. Misra, K. Kotani, I. Kawayama, H. Murakami, and M. Tonouchi. Observation of TO1 soft mode in  $\text{SrTiO}_3$  films by terahertz time domain spectroscopy. *Applied Physics Letters*, 87(18) :2909, 2005.
- [136] J Petzelt, T Ostapchuk, I Gregora, I Rychetský, S Hoffmann-Eifert, AV Pronin, Yu Yuzyuk, BP Gorshunov, S Kamba, V Bovtun, et al. Dielectric, infrared, and Raman response of undoped  $\text{SrTiO}_3$  ceramics : Evidence of polar grain boundaries. *Physical Review B*, 64(18) :184111, 2001.
- [137] L Goux, M Gervais, F Gervais, C Champeaux, and A Catherinot. Pulsed laser deposition of ferroelectric bst thin films on perovskite substrates : an infrared characterization. *International Journal of Inorganic Materials*, 3(7) :839–842, 2001.
- [138] Naoki Matsumoto, Takashi Fujii, Keisuke Kageyama, Hiroshi Takagi, Takeshi Nagashima, and Masanori Hangyo. Measurement of the Soft-Mode Dispersion in  $\text{SrTiO}_3$  by Terahertz Time-Domain Spectroscopic Ellipsometry. *Japanese Journal of Applied Physics*, 48(9S1) :09KC11, 2009.
- [139] H Nemec, P Kuzel, L Duvillaret, A Pashkin, M Dressel, and MT Sebastian. Highly tunable photonic crystal filter for the terahertz range. *Optics letters*, 30(5) :549–551, 2005.
- [140] J Petzelt, T Ostapchuk, A Pashkin, and I Rychetský. FIR and near-millimetre dielectric response of  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{BaTiO}_3$  and BST films and ceramics. *Journal of the European Ceramic Society*, 23(14) :2627–2632, 2003.
- [141] Gregory Houzet, Karine Blary, Sylvie Lepilliet, Didier Lippens, Ludovic Burgnies, Gabriel Vélú, Jean-Claude Carru, Edwin Nguéma, and Patrick Mounaix. Dielectric dispersion of  $\text{BaSrTiO}_3$  thin film from centimeter to submillimeter wavelengths. *Journal of Applied Physics*, 109 :014116, 2011.

- [142] D Nuzhnyy, J Petzelt, I Rychetsky, V Buscaglia, MT Buscaglia, and P Nanni. THz and IR dielectric response of BaTiO<sub>3</sub> core-shell composites : evidence for interdiffusion. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 42(15) :155408, 2009.
- [143] M Jain, SB Majumder, RS Katiyar, FA Miranda, and FW Van Keuls. Improvement in electrical characteristics of graded manganese doped barium strontium titanate thin films. *Applied physics letters*, 82(12) :1911–1913, 2003.
- [144] Takashi Teranishi, Takuya Hoshina, Hiroaki Takeda, and Takaaki Tsurumi. Polarization behavior in diffuse phase transition of Ba<sub>x</sub>Sr<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub> ceramics. *Journal of Applied Physics*, 105(5) :4111, 2009.
- [145] T Ostapchuk, J Petzelt, P Kuzel, S Veljko, A Tkach, P Vilarinho, I Ponomareva, L Bellaiche, E Smirnova, V Lemanov, et al. Infrared and THz soft-mode spectroscopy of (Ba, Sr) TiO<sub>3</sub> ceramics. *Ferroelectrics*, 367(1) :139–148, 2008.
- [146] AS Barker Jr, AA Ballman, and JA Ditzenberger. Infrared Study of the Lattice Vibrations in LiTaO<sub>3</sub>. *Physical Review B*, 2(10) :4233, 1970.
- [147] Mark S Wheeler, J Stewart Aitchison, and Mohammad Mojahedi. Three-dimensional array of dielectric spheres with an isotropic negative permeability at infrared frequencies. *Physical Review B*, 72(19) :193103, 2005.
- [148] VM Ferreira, JL Baptista, S Kamba, and J Petzelt. Dielectric spectroscopy of MgTiO<sub>3</sub>-based ceramics in the 10<sup>9</sup>–10<sup>14</sup>Hz region. *Journal of materials science*, 28(21) :5894–5900, 1993.
- [149] Ricardo A. Depine and Akhlesh Lakhtakia. A new condition to identify isotropic dielectric-magnetic materials displaying negative phase velocity. *Microwave and Optical Technology Letters*, 41(4) :315–316, 2004.
- [150] Fuli Zhang, Lei Kang, Qian Zhao, Ji Zhou, and Didier Lippens. Magnetic and electric coupling effects of dielectric metamaterial. *New Journal of Physics*, 14(3) :033031, 2012.
- [151] R Clausius. *Die Mechanische Behandlung der Electricitat*. Vieweg+ Teubner Verlag, 1879.
- [152] Neil William Ashcroft and N David Mermin. *Physique des solides*. EDP sciences, 2012.
- [153] A. H. Sihvola. Metamaterials and depolarization factors. *Progress In Electromagnetics Research*, 51 :65–82, 2005.
- [154] R. Ruppín. Evaluation of extended Maxwell-Garnett theories. *Optics Communications*, 182(46) :273 – 279, 2000.

**Titre :** Métamatériaux « *tout-diélectrique* » pour le térahertz

**Mots clés :** Métamatériaux, diélectrique, térahertz, résonances de Mie, éléments finis, indice négatif

**Résumé :** Les métamatériaux sont des structures composites périodiques sub-longueur d'onde pouvant posséder une perméabilité et/ou une permittivité négative. Si ces deux grandeurs sont négatives simultanément, nous sommes en présence d'un matériau à indice négatif, appelé parfois matériau « main gauche », capable donc de réfraction négative. Par le contrôle de certaines propriétés de la matière les métamatériaux offrent des comportements inexistant dans la nature. Ceci ouvre ainsi la voie à de nouvelles applications.

Dans cette thèse, l'utilisation de matériaux diélectriques se justifie par la réduction d'un inconvénient majeur, les pertes. On s'affranchit en effet de la limite des pertes ohmiques dans les matériaux métalliques. Une étude numérique approfondie des résonateurs diélectriques, composants de base des métamatériaux « tout-diélectrique », a été menée à l'aide d'un logiciel commercial de modélisation par éléments finis. Cette étude a permis de mettre en évidence, à l'entrée de la gamme térahertz, une perméabilité, une permittivité et un indice de réfraction négatifs, avec deux céramiques particulières : le  $\text{SrTiO}_3$  et le  $\text{TiO}_2$ .

Les études paramétriques effectuées sur ces deux céramiques ont permis de mettre en évidence le rôle primordial du couplage inter-modal dans l'obtention d'un indice négatif. Nous avons également montré le caractère non conventionnel du couplage inter-modal lorsque les deux modes sont de nature différente, l'un magnétique, l'autre électrique. Il existe en effet deux régimes de couplage distincts, l'un de simple rapprochement des modes de résonances, l'autre de dégénérescence des modes, où ceux-ci restent à la même fréquence sur une large gamme, chose jusqu'alors peu mise en évidence dans la littérature.

En plus de cet apport théorique, nos études paramétriques ont permis de proposer une alternative au paradigme à deux résonateurs, en montrant la faisabilité, au térahertz, d'un métamatériau à indice négatif à l'aide d'une cellule élémentaire à un seul résonateur bimodal, pouvant être beaucoup plus simple à fabriquer.

**Title:** All-dielectric Metamaterials at terahertz frequencies

**Keywords:** metamaterials, dielectrics, terahertz, Mie resonance, finite element method, negative index

**Abstract:** Metamaterials are periodic sub wavelength composite structures how may have a negative permeability and / or a negative permittivity. If permittivity and permeability are negative simultaneously, we are in presence of what we called a negative index material, sometimes called "left hand media", capable of negative refraction. By controlling some of these properties, metamaterials allow us to obtained behavior nonexistent in nature. This opens the way to new applications.

In this thesis, the use of dielectric materials is justified by the reduction of a major downside: losses. Thanks to the removal of ohmic losses specific to metallic materials. A thorough numerical study of dielectric resonators, basic components of "all-dielectric" metamaterials, was conducted using a commercial software based on finite element method. This study highlighted, at the beginning of the terahertz range, a negative permeability, a negative permittivity and a negative index, with two special ceramics, well known in literature:  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{TiO}_2$ .

The parametric studies on these ceramics have allowed to put in clear the key role of the inter-modal coupling in order to obtain a negative index. We have also shown the unconventional nature of inter-modal coupling when the two modes concerned are different: one magnetic, other electric. There are in fact two different coupling regimes: a simple progressive shifting of both resonance modes, and then the apparition of degenerative regime, where both modes are at the same frequency for a long range, something not really highlighted in the literature.

In addition to this theoretical contribution, our parametric studies have proposed an alternative to the two resonators paradigm, showing the possibility, in terahertz range, to design a negative index metamaterial with a single bimodal resonator in the unit cell, how could be much more simple to fabricate.